

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS

PROFMAT - MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**AJUSTE POLINOMIAL DE DADOS PELO MÉTODO DOS  
MÍNIMOS QUADRADOS:  
UM ESTUDO SOBRE TENSÃO  $\times$  DEFORMAÇÃO**

Thiago Pires Santana

**Orientadora:** Prof. Dr. Ana Carla Percontini da Paixão

**Co-orientador:** Prof. Me. Cristiano Henrique de Oliveira Mascarenhas

Feira de Santana

outubro de 2017

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS

PROFMAT - MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL

**AJUSTE POLINOMIAL DE DADOS PELO MÉTODO DOS  
MÍNIMOS QUADRADOS:  
UM ESTUDO SOBRE TENSÃO×DEFORMAÇÃO**

Thiago Pires Santana

Dissertação apresentada ao Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional - PROFMAT do Departamento de Ciências Exatas, UEFS, como requisito parcial para a obtenção do título de **Mestre**.

**Orientadora:** Prof. Dr. Ana Carla Percontini da Paixão

**Co-orientador:** Prof. Me. Cristiano Henrique de Oliveira Mascarenhas

Feira de Santana  
20 de outubro de 2017

## Ficha Catalográfica – Biblioteca Central Julieta Carteado

Santana, Thiago Pires

S223a Ajuste polinomial de dados pelo método dos mínimos quadrados: um estudo sobre tensão x deformação./ Thiago Pires Santana. Feira de Santana, 2017.  
62f.

Orientadora: Ana Carla Percontini da Paixão  
Dissertação (Mestrado em Matemática) – Universidade Estadual de Feira de Santana. Departamento de Ciências Exatas, 2017.

1. Modelagem matemática. 2. Ajuste de curva. 3. Método de mínimos quadrados. I. Paixão, Ana Carla Percontini da, orient. II. Universidade Estadual de Feira de Santana. III. Título.

CDU : 519.654



ATA DA SESSÃO PÚBLICA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DO DISCENTE THIAGO PIRES SANTANA DO PROGRAMA DE MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Aos vinte dias do mês de outubro de dois mil e dezessete às 9:00 horas LEMA, UEFS, ocorreu a Sessão pública de defesa de dissertação apresentada com o título “Ajuste Polinomial de Dados pelo Método dos Mínimos Quadrados: Um Estudo Sobre Tensão x Deformação”, do discente Thiago Pires Santana, sob orientação da Profa. Dra. Ana Carla Percontini da Paixão, do Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional - PROFMAT da Universidade Estadual de Feira de Santana, para obtenção do título de MESTRE. A Banca Examinadora foi composta pelos professores: Cristiano Henrique de Oliveira Mascarenhas (Coorientador, UEFS), Jailson Araújo Rodrigues (IFBA) e Ademakson Souza Araújo (UEFS). A sessão de defesa constou da apresentação do trabalho pelo discente e das arguições dos examinadores.

Em seguida, a Banca Examinadora se reuniu em sessão secreta para julgamento final do trabalho e atribuiu o conceito: APROVADO.

Sem mais a tratar, foi lavrada a presente ata, que segue assinada pelos membros da Banca Examinadora e pelo Coordenador Acadêmico Institucional do PROFMAT. Feira de Santana, 20 de outubro de 2017.

Prof. MSc. Cristiano Henrique de Oliveira Mascarenhas (UEFS)  
Coorientador

Prof. Dr. Jailson Araújo Rodrigues (IFBA)

Prof. Dr. Ademakson Souza Araújo (UEFS)

Visto do Coordenador:

Prof. Dr. Haroldo Galvães Benatti  
Coordenador do PROFMAT/UEFS

# Agradecimentos

Nesta seção, dedico as minhas homenagens e agradecimentos a todos que de alguma forma colaboraram para que eu obtivesse sucesso nas disciplinas do curso e concretizasse essa dissertação.

Agradeço inicialmente a Universidade Estadual de Feira de Santana, instituição que me honro muito em fazer parte, pela sua excelência, qualidade de ensino e em particular pelas experiências acadêmicas que proporciona aos seus estudantes. Também agradeço a CAPES, pelo apoio financeiro, pois sem ele seria difícil chegar a este momento.

Agradeço em particular a minha esposa Pricila Araujo, meus pais, Gilza Maria e Carleondas Santana pelo apoio em momentos de dificuldades, pelas palavras de conforto e pelo ombro amigo.

Não poderia deixar evidente os meus agradecimentos a minha orientadora, Professora Doutora Ana Carla Percontini da Paixão, pelo tempo disponibilizado e pelo apoio científico em todos os momentos.

Também agradeço ao professor Cristiano Mascarenhas pelo apoio acadêmico, disponibilidade e compromisso, pois sem suas contribuições não seria possível concluir este trabalho em tempo hábil.

Aos familiares, colegas e amigos um agradecimento especial pelo apoio, estímulo e ajuda incondicional.

# Resumo

Este trabalho apresenta o processo de ajuste de curva para dados experimentais, usando o método dos mínimos quadrados para aproximar esses pontos a funções polinomiais e posteriormente abordando o estudo de caso da tensão  $\times$  deformação no aço carbono *SAE1020*. Após a descrição de algumas definições, operações e propriedades associadas aos problemas em estudo, é definido e ilustrado o método de mínimos quadrados, sua estrutura algébrica, matrizes associadas e sistemas de equações. Nesse mesmo contexto, é interpretado o coeficiente de determinação como forma de avaliação da qualidade do ajuste e em seguida feito o estudo sobre o fenômeno de tensão  $\times$  deformação. Por fim é descrita uma proposta didática para aplicação do método de mínimos quadrados para os dados tensão  $\times$  deformação.

**Palavras-chave:** Ajuste de curva. Polinômios. Método de mínimos quadrados.

# Abstract

This work presents the curve fitting process for experimental data using the least squares method to approximate these points to polynomial functions and later approaching the case study of tension versus strain in *SAE1020* carbon steel. This work presents the curve fitting process for experimental data, using the least squares method to approximate these points to polynomial functions and later approaching the case study of tension versus deformation in *SAE1020* carbon steel. After describing some definitions, operations and properties associated with the problems under study, the least squares method, its algebraic structure, associated matrices, systems of equations is defined and illustrated. In the same context the coefficient of determination is interpreted as an evaluation form of the quality of fit and then the study of the tension versus deformation phenomenon. Finally, a didactic proposal for the application of the least squares method for the tension versus strain data.

**key-words:** Curve adjustment. Polynomials. Least squares method.

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama de dispersão . . . . .	15
2.2	Representação geométrica do Teorema 2.2 . . . . .	17
2.3	Ajuste dos pontos . . . . .	30
3.1	Máquina universal de ensaio de tração - Marca EMIC, modelo DL 3000 . . . . .	32
3.2	Modelo de um corpo de prova para ensaio de tração . . . . .	33
3.3	Comportamento tensão-deformação típico de um metal, mostrando as deformações elástica e plástica, o limite de proporcionalidade P e o limite de escoamento $\sigma_1$ , determinado usando o método da pré-deformação de 0,002. . . . .	34
3.4	Comportamento, tensão-deformação, esquemático encontrado em alguns aços que apresentam o fenômeno do limite de escoamento superior. . . . .	34
3.5	Gráfico de dispersão Tensão×Deformação . . . . .	36
3.6	Gráfico de dispersão e Função ajustada . . . . .	41
3.7	Gráfico de dispersão e Função ajustada à porção elástica . . . . .	42
3.8	Gráfico de dispersão e Função ajustada à porção plástica . . . . .	43
3.9	Gráfico de dispersão e as Funções ajustadas . . . . .	44
4.1	Gráfico de dispersão . . . . .	48

# Lista de Tabelas

2.1	Coordenadas do ponto $(x_i, y_i)$ . . . . .	25
3.1	Dados gerados pelo ensaio de tração utilizando medição por processamento digital de imagem. . . . .	35
3.2	Estimativas para construção do sistema 3.1 . . . . .	38
3.3	Estimativas para o cálculo do coeficiente de determinação . . . . .	40
3.4	Pontos da região elástica . . . . .	41
3.5	Pontos da região plástica . . . . .	43
4.1	Pontos da região elástica . . . . .	47
4.2	Pontos da região plástica . . . . .	48
4.3	Dados do fenômeno de tensão $\times$ deformação . . . . .	49

# Sumário

Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
Sumário	ix
Introdução	1
<b>1 Elementos de Álgebra Linear e Cálculo Diferencial</b>	<b>5</b>
1.1 Corpo, Matrizes e Sistemas Lineares . . . . .	5
1.2 Vetores no espaço . . . . .	9
<b>2 Ajuste de curva: aproximação discreta polinomial</b>	<b>15</b>
2.1 Ajuste polinomial . . . . .	16
2.2 Ajuste polinomial pelo método dos mínimos quadrados . . . . .	18
2.3 Grau do polinômio no ajuste . . . . .	23
2.4 Qualidade do ajuste . . . . .	24
2.5 Exemplo: Ajuste linear . . . . .	24
2.5.1 Uma outra abordagem do problema . . . . .	28
<b>3 Problema: tensão <math>\times</math> deformação</b>	<b>31</b>
3.1 Contexto do problema . . . . .	31
3.2 Descrição do experimento . . . . .	33
3.3 Ajuste Polinomial dos dados tensão $\times$ deformação . . . . .	34
<b>4 Proposta de discussão na educação básica do problema de ajuste da relação tensão <math>\times</math> deformação</b>	<b>45</b>
4.1 Atividade . . . . .	45
<b>5 Conclusão</b>	<b>51</b>



# Introdução

A matemática, tanto quanto outras ciências, vem se desenvolvendo cada vez mais no contexto científico e educacional, sobretudo no desenvolvimento de pesquisas que estão relacionadas com a realidade posta por outros ramos do conhecimento científico. Procurando, transversalmente, descrever os fenômenos estudados com ferramentas matemáticas, dialogando com a matemática e as outras áreas do conhecimento.

A descrição de fenômenos nas ciências naturais, humanas, engenharia, informática e outras áreas do conhecimento humano, por meio da matemática, está associada diretamente ao nosso entendimento sobre modelagem matemática <sup>1</sup>. Nesse sentido, o ajuste de curva pelo **Método dos Mínimos Quadrados** apresenta-se como uma ferramenta capaz de explicar fenômenos da natureza, isto é, um instrumento de modelagem.

Como estamos interessados em estudar o fenômeno tensão  $\times$  deformação do aço carbono 1020, desejando estabelecer um perfil para a tensão em função da deformação, dispondo de dados tabelados a partir de ensaios de tração, o uso de uma ferramenta matemática que nos permita otimizar tal função é indispensável, para isto, admitiremos o Método dos Mínimos Quadrados.

O Método dos Mínimos Quadrados, para o caso discreto <sup>2</sup>, é aplicado quando temos um conjunto de dados, nos restringiremos a duas variáveis, e desejamos encontrar uma função que descreva os dados de forma mais realística possível, permitindo interpolações e extrapolações com minimização de erros. Neste método se minimiza a soma dos quadrados dos desvios entre o valor observado no experimento e a estimativa dada pela função. Que veremos em maiores detalhes no capítulo 3.

Tanto na educação básica, quanto na educação superior nos deparamos com modelos de funções, especialmente as polinomiais, que são usadas como descritoras de fenômenos. Porém, não nos é mostrado nem indicado, como essas funções ou esses modelos são construídos. Um exemplo disso, é o modelo físico para a altura de um objeto lançado

---

<sup>1</sup>Entendemos a modelagem matemática como a representação de um dado fenômeno através de uma ferramenta ou conjunto de ferramentas (matemática) com o objetivo de interpretação e descrição do dado fenômeno. Mais informações ler [7] e [8].

<sup>2</sup>O ajuste de curva pelo método dos mínimos quadrados admite o caso discreto que apresentaremos neste trabalho e o caso contínuo que é usado quando queremos aproximar uma função (normalmente mais complexa onde existem dificuldades na sua manipulação) a uma outra função mais simples de ser analisada.

verticalmente, cuja equação é dada por  $h(t) = h_0 + v_0t + \frac{gt^2}{2}$ . Nesse sentido, o tema dessa pesquisa está envolvido na discussão da metodologia dos mínimos quadrados para construção de uma função polinomial, para um conjunto de pontos experimentais, isto é, melhor ajuste de curva aos pontos obtidos experimentalmente.

É também objetivo deste trabalho torná-lo útil como ferramenta de aprendizagem para os alunos e professores, em especial do ensino médio. Para tanto, desenvolvemos alguns procedimentos (atividades orientadas) de forma a contribuir para o amadurecimento do tema e disseminar a cultura matemática em áreas afins.

## Caracterização da pesquisa

Essa investigação procura, dentro de uma perspectiva reflexiva e questionadora, estudar a construção de uma função polinomial pelo método dos mínimos quadrados, a partir de um conjunto de dados obtidos em um experimento de tensão×deformação, fazendo sua avaliação e determinando seu poder descritivo.

No sentido de nortear nossa pesquisa e enquadrar o foco do estudo são expostas abaixo as questões que esta pesquisa procura responder:

- O que é ajuste de curva?
- O que é ajuste polinomial?
- O que é o método dos mínimos quadrados?
- Como ocorre o ajuste de um polinômio a um conjunto de dados pelo método dos mínimos quadrados?
- Qual o polinômio que se ajusta a um conjunto de dados em um problema tensão × deformação?

As questões abordadas nessa pesquisa dão ênfase ao processo de construção de uma função que caracterize e descreva o fenômeno de tensão e deformação em estudo.

Como pretendemos ajustar uma curva ao fenômeno de tensão×deformação, evento de natureza complexa por causa dos múltiplos fatores associados, entendemos que essa investigação assume características e adequações de um estudo de caso, pois o mesmo pode ser compreendido como um estudo intensivo de um ou poucos objetivos, de forma que permita um amplo detalhamento [27], comum em pesquisas onde o investigador possui dificuldades de controlar ou manipular comportamentos relevantes.

## Relevância do estudo

Esse trabalho tem relevância, inicialmente, por apresentar uma abordagem bastante significativa para o pesquisador, que na condição de professor de matemática, sempre esteve ligado a problemas de natureza estritamente matemática bem como associados a ciências humanas ou problemas da educação matemática.

Nas ciências aplicadas os fenômenos, em sua maioria, são descritos matematicamente através de gráficos, tabelas e funções que buscam explicar seus comportamentos. A importância de estudar os métodos de aproximação, como o Método dos Mínimos Quadrados, para interpretar fenômenos oriundos de pesquisas nos vários ramos das ciências é percebida, por exemplo, no momento em que necessitamos definir um modelo para descrição de um experimento que possibilite a previsão de resultados confiáveis.

O método dos mínimos quadrados é uma ferramenta importante no processo de análise de dados experimentais e também uma alternativa didática no processo de ensino e aprendizagem, pois, além de descrever fenômenos científicos ele pode dar significado a muitos conteúdos estudados na educação básica.

Vemos neste trabalho uma adequação dentro do escopo definido pelo PROFMAT, assim como uma ferramenta de cunho social e acadêmico para os professores e escolas que o aplicarem.

## Estruturação do trabalho

Esse trabalho é composto de cinco capítulos distribuídos da seguinte forma:

Na introdução apresentamos o objeto da pesquisa, a metodologia, justificativa, além da fundamentação teórica.

No primeiro capítulo, apresentamos os principais conceitos, propriedades e teoremas associados ao problema de ajuste de curva pelo método dos mínimos quadrados, os quais serão utilizados nesse trabalho. Entre eles estão os conceitos de matrizes, suas operações e propriedades, sistemas lineares, forma matricial, vetores, espaço vetorial, dependência linear, produto escalar, norma, ortogonalidade e mínimos de funções de várias variáveis.

No capítulo 2 definimos ajuste polinomial. Também caracterizamos o método dos mínimos quadrados para um polinômio de grau  $n$ , argumentando sobre como definir o grau do polinômio e como avaliar a qualidade do ajuste, além de um exemplo para descrição do método.

No capítulo 3 detalhamos o estudo sobre o problema de tensão e deformação, analisando sua dispersão, descrevendo a curva ajustada e avaliando sua qualidade.

Descrevemos no quarto capítulo uma atividade que pode ser trabalhada na educação básica. Traçamos um conjunto de competências e habilidades que são trabalhadas nessa atividade e momentos de desenvolvimento didático da atividade. Neste mesmo capítulo, a

atividade foi descrita em três níveis para que possa ser escolhida a proposta mais adequada à realidade dos alunos.

Por fim, apresentamos as considerações finais a que a pesquisa pôde chegar, assim como algumas recomendações e possíveis estudos complementares e futuros.

# Capítulo 1

## Elementos de Álgebra Linear e Cálculo Diferencial

Este capítulo irá apresentar resultados básicos da Álgebra Linear e do Cálculo Diferencial que serão significantes durante a exposição do trabalho para melhor compreensão do método dos mínimos quadrados, que é apresentado no capítulo seguinte.

### 1.1 Corpo, Matrizes e Sistemas Lineares

**Definição 1.1.** *Um corpo comutativo é um conjunto  $\mathbb{K}$ , cujos elementos são chamados de escalares, com um par de operações:*

$$\begin{aligned} + \text{ adição: } & x \in \mathbb{K} \text{ e } y \in \mathbb{K} \Rightarrow x + y \in \mathbb{K} \\ \times \text{ multiplicação: } & x \in \mathbb{K} \text{ e } y \in \mathbb{K} \Rightarrow x \times y \in \mathbb{K}, \end{aligned}$$

*satisfazendo as seguintes propriedades:*

1.  $x + y = y + x$ , para todo  $x, y \in \mathbb{K}$ ;
2.  $x + (y + z) = (x + y) + z$ , para todo  $x, y, z \in \mathbb{K}$ ;
3. Existe um único elemento  $0 \in \mathbb{K}$ , tal que  $x + 0 = x$ , para todo  $x \in \mathbb{K}$ ;
4. A cada  $x \in \mathbb{K}$  corresponde um único elemento  $-x \in \mathbb{K}$  tal que  $x + (-x) = 0$ ;
5.  $x \times y = y \times x$  para todo  $x, y \in \mathbb{K}$ ;
6.  $x \times (y \times z) = (x \times y) \times z$ , para todo  $x, y, z \in \mathbb{K}$ ;
7. Existe um único elemento  $1 \in \mathbb{K} - \{0\}$ , tal que  $x \times 1 = x$ , para todo  $x \in \mathbb{K}$ ;
8. A cada  $x \in \mathbb{K} - \{0\}$  ( $x$  não-nulo) corresponde um único elemento  $x^{-1} = \frac{1}{x}$  em  $\mathbb{K}$ , tal que  $x \times x^{-1} = 1$ ;

9.  $x \times (y + z) = x \times y + x \times z$ , para todo  $x, y, z \in \mathbb{K}$ .

**Definição 1.2.** Uma matriz  $A_{m \times n}$  é uma coleção de  $m \cdot n$  escalares de um corpo  $\mathbb{K}$  denotado por  $A = (a_{ij})_{m \times n}$ , com  $i \in \mathbb{N}$ ,  $1 \leq i \leq m$  e  $j \in \mathbb{N}$ ,  $1 \leq j \leq n$ . A matriz é escrita como uma tabela bidimensional. Admitindo forma geral:

$$A = (a_{ij})_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}.$$

**Observação 1.3.** Consideraremos neste trabalho que todas as matrizes são reais,  $a_{ij} \in \mathbb{R}$ , e os índices dos elementos  $i, j \in \mathbb{N}$ , tal que  $i, j \geq 1$ .

**Definição 1.4.** Dadas duas matrizes  $A = (a_{ij})_{m \times n}$  e  $B = (b_{ij})_{m \times n}$ , com mesmo número de linhas e colunas, chamamos soma da matriz  $A$  com a matriz  $B$ , indicando por  $A + B$ , a matriz  $C = (c_{ij})_{m \times n}$ , tal que  $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$  para todo  $i = 1, 2, \dots, m$  e  $j = 1, 2, \dots, n$ . Da mesma forma a diferença é dada por  $c_{ij} = a_{ij} - b_{ij}$ , para todo  $i = 1, 2, \dots, m$  e  $j = 1, 2, \dots, n$ . Além disso, são válidas as seguintes propriedades:

1.  $A + B = B + A$ ;
2.  $(A + B) + C = A + (B + C)$ ;
3.  $A + 0 = 0 + A$  ( $0$  é a matriz nula <sup>1</sup>);
4.  $A + (-A) = 0$ .

**Definição 1.5.** Dada uma matriz  $A = (a_{ij})_{m \times n}$  e um número real  $k$ , chamamos de produto escalar de  $k$  por  $A$ , a matriz  $B = (b_{ij})_{m \times n}$ , tal que,  $b_{ij} = ka_{ij}$ , denotada por  $B = kA$ . As seguintes propriedades são satisfeitas:

1.  $\lambda(kA) = (\lambda k)A$  com ( $\lambda$  e  $k$  constantes reais);
2.  $k(A + B) = kA + kB$ ;
3.  $(\lambda + k)A = \lambda A + kA$ ;
4.  $1A = A$ .

**Definição 1.6.** Considere as matrizes  $A = (a_{ij})_{m \times n}$  e  $B = (b_{jk})_{n \times p}$ , definimos como o produto de  $A$  por  $B$  como sendo a matriz  $C = (c_{ik})_{m \times p}$ , onde cada  $c_{ik}$  é dado por,

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^n a_{ij}b_{jk} = a_{i1}b_{1k} + a_{i2}b_{2k} + \cdots + a_{in}b_{nk},$$

---

<sup>1</sup>Matriz nula é a matriz que possui todos os elementos  $a_{ij} = 0$ .

satisfazendo as seguintes propriedades:

1.  $(AB)C = A(BC)$ ;
2.  $(A + B)C = AC + BC$ ;
3.  $C(A + B) = CA + CB$ ;
4.  $IA = A, AI = A$  ( $I$  é a matriz identidade <sup>2</sup>);
5.  $(kA)B = A(kB) = k(AB)$ .

A multiplicação de matrizes, em geral, não é comutativa. Por exemplo:

Considere  $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$  e  $B = \begin{bmatrix} -1 & 3 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$  logo  $AB = \begin{bmatrix} 7 & 7 \\ 13 & 17 \end{bmatrix}$  e  $BA = \begin{bmatrix} 8 & 10 \\ 10 & 16 \end{bmatrix}$ .

**Definição 1.7.** Seja  $A = (a_{ij})_{m \times n}$ , então a sua transposta é dada por  $A^t = (a_{ji})_{n \times m}$ , cujas colunas são formadas com as linhas correspondentes de  $A$ , e satisfaz as seguintes propriedades:

1.  $(A^t)^t = A$ ;
2.  $(A + B)^t = A^t + B^t$ ;
3. Para qualquer escalar  $k$ ,  $(kA)^t = kA^t$ ;
4.  $(AB)^t = B^t A^t$ ;

**Definição 1.8.** Seja  $A$  uma matriz quadrada <sup>3</sup> e não singular (ou inversível) <sup>4</sup>, então a matriz  $A^{-1}$ , tal que,  $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ , é definida como matriz inversa de  $A$ , satisfazendo as seguintes propriedades:

1.  $A^{-1}A = AA^{-1} = I$ ;
2.  $\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$ , onde  $\det(A)$ <sup>5</sup> é o determinante da matriz  $A$ ;
3.  $(A^{-1})^{-1} = A$ ;
4.  $(A^t)^{-1} = (A^{-1})^t$ ;

<sup>2</sup>Matriz identidade é a matriz que possuem os elementos definidos da forma  $a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$

<sup>3</sup>Uma matriz é dita quadrada quando ela possui o mesmo número de linhas e colunas

<sup>4</sup>Uma matriz é dita não singular ou inversível quando seu determinante é diferente de zero, ou seja, existe  $A^{-1}$ .

<sup>5</sup> $\det A = \sum_p (-1)^J a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n}$  onde  $J = J(j_1, \dots, j_n)$  é o número de inversões da permutação  $(j_1, \dots, j_n)$  e  $p$  indica que a soma é estendida a todas as  $n!$  permutações de  $(1, 2, \dots, n)$ . Mais detalhes ver [9], [17].



## 1.2 Vetores no espaço

**Definição 1.12.** *Um espaço vetorial sobre um corpo  $\mathbb{K}$  é um conjunto  $V$ , cujos elementos são chamados vetores, e um par de operações:*

$$\begin{aligned} + \text{ adição: } & u \in V \text{ e } v \in V \Rightarrow u + v \in V \\ \times \text{ multiplicação: } & v \in V, k \in \mathbb{K} \Rightarrow kv \in V \end{aligned}$$

*que satisfaz as propriedades:*

1.  $u + v = v + u$ , para todo  $u, v \in V$ ;
2.  $(u + v) + w = u + (v + w)$ , para todo  $u, v, w \in V$ ;
3. Existe um elemento  $0 \in V$ , tal que  $v + 0 = v$ , para todo  $v \in V$ ;
4. Cada  $v \in V$ , existe um único elemento  $-v \in V$  tal que  $v + (-v) = 0$ ;
5.  $(k_1 + k_2)v = k_1v + k_2v$ , para todo  $v \in V$  e para todo  $k_1, k_2 \in \mathbb{K}$ ;
6.  $k(u + v) = ku + kv$ , para todo  $u, v \in V$  e para todo  $k \in \mathbb{K}$ ;
7.  $1v = v$ , para todo  $v \in V$ ;
8.  $(k_1k_2)v = k_1(k_2v)$  para todo  $v \in V$  e para todo  $k_1, k_2 \in \mathbb{K}$ .

**Definição 1.13.** *Considerando  $n$  um número natural positivo e  $a_1, a_2, \dots, a_n$  elementos*

*de um corpo, então a  $n$ -upla ordenada  $\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$  é definida como um vetor. Estes vetores são elementos do espaço vetorial  $V = R^n$*

**Observação 1.14.** *Admitiremos os vetores na forma de coluna e suas transpostas como vetores linha, os mesmos são interpretados como matrizes coluna ou linha, respectivamente.*

**Definição 1.15.** *Dados os escalares  $k$  e  $r$ , números reais, e os vetores  $u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$  e*

$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$ , então:

$$\text{i) } ku = \begin{bmatrix} ku_1 \\ ku_2 \\ \vdots \\ ku_n \end{bmatrix};$$

$$\text{ii) } ku \pm rv = \begin{bmatrix} ku_1 \pm rv_1 \\ ku_2 \pm rv_2 \\ \vdots \\ ku_n \pm rv_n \end{bmatrix}.$$

Considerando os vetores  $u, v$  e  $w$ , e sejam  $k, r$  escalares, são satisfeitas as seguintes propriedades:

1.  $u + v = v + u$ ;
2.  $(u + v) + w = u + (v + w)$ ;
3.  $u + 0 = 0 + u$  ( $0$  é vetor nulo);
4.  $u + (-u) = 0$ ;
5.  $k(ru) = (kr)u$ ;
6.  $k(u + v) = ku + kv$ ;
7.  $(k + r)u = ku + kv$ ;
8.  $1u = u$ .

**Definição 1.16.** *Seja  $V$  um espaço vetorial sobre o corpo  $\mathbb{K}$ . Um subconjunto  $S \subset V$  é um subespaço de  $V$  se  $S$  for um espaço vetorial sobre  $\mathbb{K}$  com as mesmas operações de adição e multiplicação por escalares que fazem de  $V$  um espaço vetorial. Ou seja,  $S \subset V$  é um subespaço vetorial de  $V$  se:*

1.  $0 \in S$ ;
2.  $u \in S$  e  $v \in S \Rightarrow u + v \in S$ ;
3.  $k \in \mathbb{K}$  e  $v \in S \Rightarrow kv \in S$ .

A estrutura de espaço vetorial é importante mas apenas com ela não somos capazes de fazer medidas com os elementos do espaço (subespaço) vetorial. Para isto introduz-se no espaço um produto interno. Uma vez feito isso podemos medir ângulos, tamanhos e convergência entre elementos do espaço.

**Definição 1.17.** *Seja  $V$  um espaço vetorial de dimensão finita sobre  $\mathbb{R}$ . Entende-se por um produto interno sobre  $V$  uma aplicação que transforma cada par ordenado  $(u, v) \in V \times V$  em um número real, que indicaremos por  $\langle u, v \rangle$ . Obedecendo as seguintes condições:*

1.  $\langle u, u \rangle \geq 0$  e  $\langle u, u \rangle = 0 \Leftrightarrow u = 0$ , denominado de positividade do produto interno;
2.  $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$ , denominado de simetria do produto interno;
3.  $\langle ku, v \rangle = k\langle u, v \rangle$ , denominado de homogeneidade;
4.  $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$ , denominada de linearidade da primeira componente.

**Definição 1.18.** *Se  $u$  e  $v$  são dois vetores de  $n$ -uplas ordenadas, então definimos produto escalar ou produto interno padrão entre eles, o número real, tal que,*

$$\langle u, v \rangle = u^t v = \sum_{i=1}^n u_i v_i,$$

*satisfazendo as seguintes propriedades:*

1.  $\langle u, u \rangle \geq 0$  para qualquer vetor  $u$  e  $\langle u, u \rangle = 0$  se, e só se  $u = 0$ ;
2.  $\langle ku, v \rangle = k\langle u, v \rangle$  para qualquer  $k$  real;
3.  $\langle u + w, v \rangle = \langle u, v \rangle + \langle w, v \rangle$  para todo  $w$  de  $n$ -upla ordenada;
4.  $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$ .

**Observação 1.19.** *Dados dois vetores  $u, v \neq 0$  do  $\mathbb{R}^n$ , se  $\langle u, v \rangle = 0$ , então eles são perpendiculares.*

**Definição 1.20.** *Norma euclidiana ou comprimento de um vetor  $u$  é definido como a raiz quadrada positiva do produto escalar de  $u$  por  $u$ . Ou seja,*

$$\|u\| = \langle u, u \rangle^{\frac{1}{2}} = (u^t \cdot u)^{\frac{1}{2}} = \left( \sum_{i=1}^n u_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

**Definição 1.21.** *Sejam dois vetores  $u$  e  $v$  do  $\mathbb{R}^n$  definimos como distância euclidiana entre eles a função  $d: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^+$ .*

$$d(u, v) = \langle u - v, u - v \rangle^{\frac{1}{2}} = \|u - v\|.$$

**Definição 1.22.** *Um vetor  $\beta$  do espaço vetorial  $V$  é uma combinação linear dos vetores  $v_1, v_2, \dots, v_n \in V$ , se existem escalares  $c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{K}$ , tais que*

$$\beta = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n.$$

**Definição 1.23.** Seja  $V$  um espaço vetorial sobre um corpo  $\mathbb{K}$ . Dizemos que um subconjunto  $S \subset V$  é linearmente dependente (L.D.) para distintos  $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$  em  $S$  e escalares  $c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{K}$ , não todos nulos, tais que

$$c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \dots + c_nv_n = 0.$$

Um conjunto  $S$  que não é linearmente dependente é dito linearmente independente (L.I.). Isto é,  $S$  é L.I. se para todo conjunto de vetores  $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$  em  $S$  e escalares  $c_1, c_2, \dots, c_n$  em  $\mathbb{K}$ , vale a implicação:

$$c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \dots + c_nv_n = 0 \implies c_1 = c_2 = c_3 = \dots = c_n = 0.$$

Seja a matriz  $A = (a_{ij})_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$ , definimos como vetores

linha de  $A$ , os vetores  $l_1 = (a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}), l_2 = (a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}), \dots, l_m = (a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{mn})$ . O subespaço  $S_L(A)$  do  $\mathbb{R}^n$ , gerado pelos vetores linhas de  $A$ , é chamado de *espaço linha* de  $A$ . De forma análoga, definimos como vetores coluna de  $A$ , os vetores  $c_1 = (a_{11}, a_{21}, \dots, a_{m1}), c_2 = (a_{12}, a_{22}, \dots, a_{m2}), \dots, c_n = (a_{1n}, a_{2n}, \dots, a_{mn})$  de modo que o subespaço  $S_C(A)$  do  $\mathbb{R}^n$ , gerado pelos vetores coluna de  $A$ , é chamado de *espaço coluna* de  $A$ .

**Proposição 1.24.** Uma matriz da forma

$$X_{m \times n+1} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \dots & x_m^n \end{bmatrix}$$

na qual  $x_i \neq x_j$  para todo  $i \neq j$  é denominada matriz de Vandermonde.

Prova-se que as colunas de  $X$  são linearmente independentes sempre que  $n < m - 1$ .

**Definição 1.25.** Para uma Matriz  $A_{m \times n}$ , o conjunto  $N(A) = \{x \in \mathbb{R}^{n \times 1} : Ax = 0\} \subseteq \mathbb{R}^n$  é chamado de *espaço nulo* de  $A$ . Em outras palavras  $N(A)$  é simplesmente o conjunto de todas as soluções do sistema homogêneo  $Ax = 0$ .

**Definição 1.26.** Seja  $S$  um subconjunto de um espaço vetorial  $V$  com produto interno, então o complemento ortogonal de  $S$ , denotado por  $S^\perp$ , é o subconjunto de  $V$  em que todos os vetores são ortogonais a cada vetor de  $S$ .

**Exemplo 1.27.** Considere  $S$  um plano contendo a origem em  $\mathbb{R}^3$  e seja  $L$  a reta contendo a origem e perpendicular a  $S$ . Se  $z \in L$  e  $s \in S$  são não nulos, então o segmento de reta unindo  $z$  e  $0$  é perpendicular ao segmento de reta unindo  $0$  a  $s$ , isto é,  $\langle z, s \rangle = 0$ . Logo, cada vetor de  $L$  é ortogonal a todos os vetores de  $S$ . Podemos dizer que,  $S^\perp = L$  e  $L^\perp = S$ .

**Teorema 1.28.** *Seja  $S$  um subconjunto de um espaço  $V$  com produto interno. Então  $S^\perp$  é um subespaço de  $V$ .*

*Demonstração.* Suponhamos  $u, v \in S^\perp \subset V$  e  $w$  um vetor qualquer de  $S \subset V$ .

1.  $0 \in S^\perp$  já que  $\langle w, 0 \rangle = 0$ ;
2.  $u + v \in S^\perp$ . Como  $u, v \in S^\perp$  e  $w \in S$  temos que  $u \perp w$  e  $v \perp w$ , isto é,  $\langle u, w \rangle = 0$  e  $\langle v, w \rangle = 0$  daí, sabendo que  $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle = 0 + 0 = 0$  logo,  $u + v \perp w$  ou seja  $u + v \in S^\perp$ ;
3.  $kv \in S^\perp$ . Seja  $k \in \mathbb{R}$ , então  $\langle kv, w \rangle = k\langle v, w \rangle = 0$ , logo  $kv \perp w$ , ou seja,  $kv \in S^\perp$ .

□

**Proposição 1.29.** *Seja  $S$  um subespaço de dimensão finita de um espaço  $V$  com produto interno (Euclidiano), então cada vetor  $u$  de  $V$  pode ser escrito de forma única como:*

$$u = w_1 + w_2$$

onde  $w_1 \in S$  e  $w_2 \in S^\perp$ .

O vetor  $w_1$  é chamado de projeção ortogonal de  $u$  em  $S$  e o vetor  $w_2$  é chamado de projeção ortogonal de  $u$  em  $S^\perp$ . O vetor  $w_2$  também é chamado de componente de  $u$  ortogonal a  $S$ .

**Teorema 1.30.** *Seja a matriz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , então o complemento ortogonal do espaço das colunas de  $A$  é o espaço nulo de  $A^t$ .*

*Demonstração.* Considere  $l_i$  vetores linha de  $A^t$ , tal que,  $l_i \in S_L(A^t)$  e  $c_i$  vetores coluna de  $A$ , tal que,  $c_i \in S_C(A)$ . Considere também que, a partir da definição 1.7 temos  $l_i = c_i$ .

Se  $x \in N(A^t)$ , temos que  $A^t x = 0$ , o que significa que para todo  $l_i \in A^t$  temos  $\langle l_i, x \rangle = 0$ , isto é,  $x$  é ortogonal a cada linha de  $A^t$  e como as linhas de  $A^t$  geram  $S_L(A^t)$  então  $x \perp S_L(A^t)$ .

Por outro lado, se  $x$  é ortogonal a  $S_L(A^t)$ ,  $x \perp S_L(A^t)$ , temos que  $x \perp l_i$  para todo  $l_i \in A^t$ , daí  $\langle x, l_i \rangle = 0$ . Como  $S_L(A^t)$  gera as linhas de  $A^t$ , podemos afirmar que  $A^t x = 0$ , isto é,  $x \in N(A^t)$ .

Portanto,  $(S_L(A^t))^\perp = N(A^t)$ , mas como as linhas de  $A^t$  equivalem as colunas de  $A$ , temos  $S_L(A^t) = S_C(A)$ , logo

$$(S_C(A))^\perp = N(A^t).$$

□

**Definição 1.31.** Dado  $n \in \mathbb{N}$ , chama-se função real de  $n$  variáveis, ou de variável vetorial,  $p = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ , a toda regra a que associa a cada  $n$ -upla ordenada  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  de um conjunto  $D_f \subset \mathbb{R}^n$  um único valor real, denotado por  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . O conjunto  $D_f$  é o domínio de  $f$  e sua imagem é o conjunto de valores possíveis de  $f$ .

**Teorema 1.32.** Sejam  $f : D_f \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  uma função de classe  $C^1$ <sup>6</sup> definida em um subconjunto  $D_f$  de  $\mathbb{R}^n$  e  $D \subset D_f$ . Se  $p \in D$  é um extremo local de  $f$  em  $D$  e  $p$  é um ponto interior de  $D$ , então  $p$  é um ponto crítico de  $f$ , isto é, a matriz jacobiana de  $f$  em  $p$  é a matriz nula,

$$Df(p) = \left[ \begin{array}{cccc} \frac{\partial f}{\partial x_1}(p) & \frac{\partial f}{\partial x_2}(p) & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_n}(p) \end{array} \right]_{1 \times n} = \left[ \begin{array}{cccc} 0 & 0 & \cdots & 0 \end{array} \right]_{1 \times n}$$

ou, em notação vetorial,

$$\nabla f(p) = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}(p), \frac{\partial f}{\partial x_2}(p), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(p) \right) = (0, 0, \dots, 0),$$

isto é, o vetor gradiente de  $f$  em  $p$  é o vetor nulo.

**Teorema 1.33.** Considere uma função  $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  de classe  $C^2$  e  $p$  um ponto crítico de  $f$  no interior do conjunto  $D$ . Se  $D^2 f(p)$  é uma matriz positiva, então  $p$  é um ponto de mínimo de local de  $f$ .

Onde,

$$D^2 f(p) = \left[ \begin{array}{cccc} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(p) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(p) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(p) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(p) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(p) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(p) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(p) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(p) \end{array} \right]_{n \times n}$$

Prova-se em [28].

---

<sup>6</sup>Uma função  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^m$  com  $D \subseteq \mathbb{R}^n$ , é dita de classe  $C^k(D)$  se todas as suas derivadas parciais de ordem  $k$  forem contínuas

## Capítulo 2

# Ajuste de curva: aproximação discreta polinomial

Em vários estudos nas áreas aplicadas como Engenharia, Informática, Física e outras, nos deparamos com um conjunto de pontos  $(x_i, y_i)$  relacionando à variável resposta,  $y_i$ , (dependente) com a variável explicativa,  $x_i$ , (independente). Em tais fenômenos a relação entre essas duas variáveis é analisada inicialmente através do gráfico dos dados (diagrama de dispersão), já que ele nos oferece uma ideia do comportamento da relação entre os conjuntos. De modo geral desejamos encontrar uma função,  $f(x_i)$ , que melhor se ajuste aos dados, conforme ilustração abaixo.

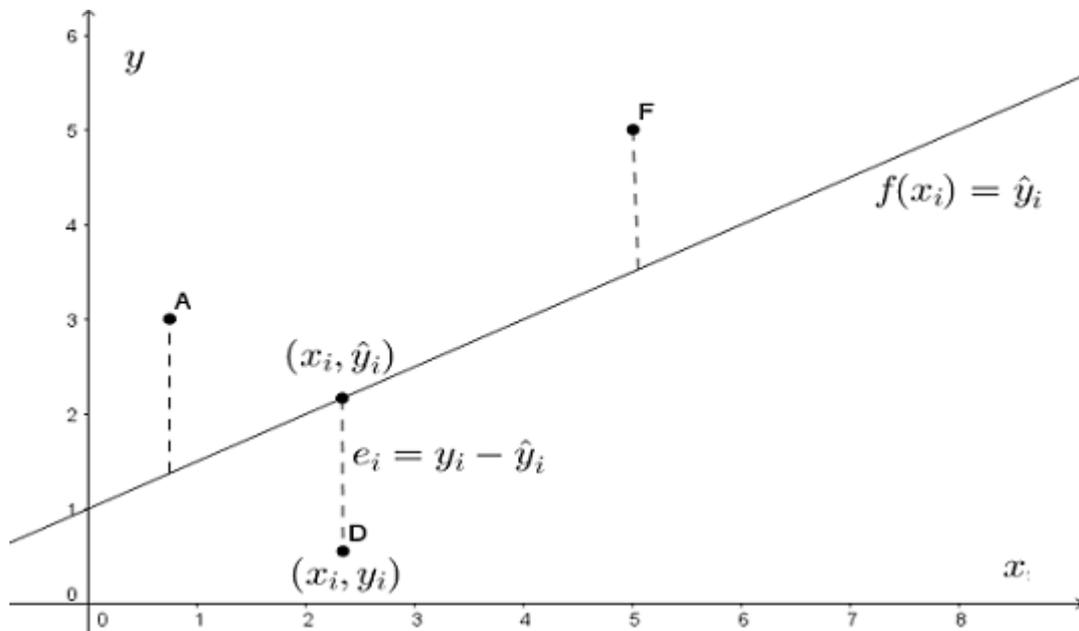


Figura 2.1: Diagrama de dispersão

O melhor ajuste, neste caso, será a função  $f(x_i) = \hat{y}_i$  que mantém os menores

resíduos  $e_i = y_i - \hat{y}_i$  possíveis. Assim, obtendo-se o ajuste adequado a um certo conjunto de dados, podemos fazer um estudo em relação ao comportamento do fenômeno pesquisado, identificando e prevendo alguns resultados. Uma medida normalmente apresentada para avaliação do comportamento da função e dos pontos é dada pela soma dos quadrados dos resíduos, também chamado de erros ou desvios.

$$E = \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m e_i^2 = e_1^2 + e_2^2 + \dots + e_m^2 = \langle e, e \rangle = \| \vec{e} \|^2,$$

com  $e = (e_1, e_2, \dots, e_m)$ .

## 2.1 Ajuste polinomial

Ajuste polinomial se refere ao problema de aproximarmos um conjunto de pontos  $\{(x_i, y_i) \mid i = 1, 2, 3, \dots, m\}$  a uma função  $\hat{y}$  representada pelo polinômio algébrico  $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$  de grau  $n < m - 1$ , e determinarmos as constantes  $a_0, a_1, \dots, a_n$  que descrevem o polinômio  $P_n(x)$ . Desse modo, aproximando os  $m$  pontos a  $P_n(x)$ , a função que descreve a soma dos quadrado dos desvios é escrita na forma

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \sum_{i=1}^n (y_i - P_n(x_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - (a_n x_i^n + a_{n-1} x_i^{n-1} + \dots + a_1 x_i + a_0))^2 \\ &= (y_1 - (a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + a_1 x_1 + a_0))^2 \\ &\quad + (y_2 - (a_n x_2^n + a_{n-1} x_2^{n-1} + \dots + a_1 x_2 + a_0))^2 \\ &\quad + \dots + (a_n x_m^n + a_{n-1} x_m^{n-1} + \dots + a_1 x_m + a_0))^2. \end{aligned}$$

Logo, conhecidos os pontos  $\{(x_i, y_i) \mid i = 1, 2, 3, \dots, m\}$ , a soma dos quadrados dos desvios é uma função de  $a_0, a_1, \dots, a_n$ , que denotaremos por  $E = E(a_0, a_1, \dots, a_n)$ .

Seja o conjunto  $\{(x_i, y_i) \mid i = 1, 2, 3, \dots, m\}$  e o polinômio  $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$  de grau  $n < m - 1$ , usando  $e_i = y_i - \hat{y}_i$  para cada ponto  $(x_i, y_i)$  e admitindo  $\hat{y}_i = P_n(x_i)$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} y_1 &= a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n + e_1 \\ y_2 &= a_0 + a_1 x_2 + \dots + a_n x_2^n + e_2 \\ &\vdots && \vdots \\ y_m &= a_0 + a_1 x_m + \dots + a_n x_m^n + e_m \end{aligned} \tag{2.1}$$

Identificando as matrizes associadas ao sistema (2.1) acima, obtemos

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{bmatrix}, \quad \alpha = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad e = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_m \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Assim, podemos escrevê-lo na forma  $y = X\alpha + e$ .

Observe que o desvio pode ser escrito como  $e = y - X\alpha$  e que também foi definido como  $e = y - \hat{y}$ . Portanto, a equação  $y - X\alpha = y - \hat{y}$  nos mostra que a função  $\hat{y} = \hat{y}(x_i) = \hat{y}_i$  é dada por  $\hat{y} = X\alpha$ . Daí, o problema de determinação dos coeficientes  $a_0, a_1, \dots, a_n$  do ajuste polinomial direciona-se ao problema de resolver o sistema  $y = X\alpha$ , mas em geral esses sistemas são inconsistentes (não têm solução exata), portanto procura-se uma solução aproximada  $\hat{y}$  de  $y$ , tal que  $\hat{y} = X\alpha$ . Segundo Boldrini [9] e Lay [17] os sistemas lineares, gerados por dados experimentais, muitas vezes não têm solução por causa de múltiplos erros que envolvem o processo, desde erros de medição (inerentes ao aparelho ou ao operador) a erros de modelagem. Portanto, para ajustar um conjunto de pontos a um polinômio  $P_n(x)$ , desejamos encontrar  $a_0, a_1, \dots, a_n$  que melhor se adequem aos pontos e minimize o erro.

**Definição 2.1.** *Seja  $V$  um espaço vetorial, um vetor  $\hat{y}_0 \in V$  é definido como solução de melhor ajuste se satisfaz a expressão,  $\|y - \hat{y}_0\| \leq \|y - z\|$ , para todo vetor  $z \in V$ .*

**Teorema 2.2.** *Seja  $S_C(X) = [1, x, x^2, \dots, x^n]$  um subespaço do  $\mathbb{R}^n$  gerado pelos monômios  $P_n(x) = x^n$ , e seja  $\hat{y}$  a projeção ortogonal de  $y$  sobre  $S_C(X)$ . Então  $\hat{y}$  é o ponto de  $S_C(X)$  mais próximo de  $y$ , tal que,  $\|y - \hat{y}\| \leq \|y - z\|$ .*

De fato, a Figura 2.2 mostra uma interpretação geométrica do teorema anterior.

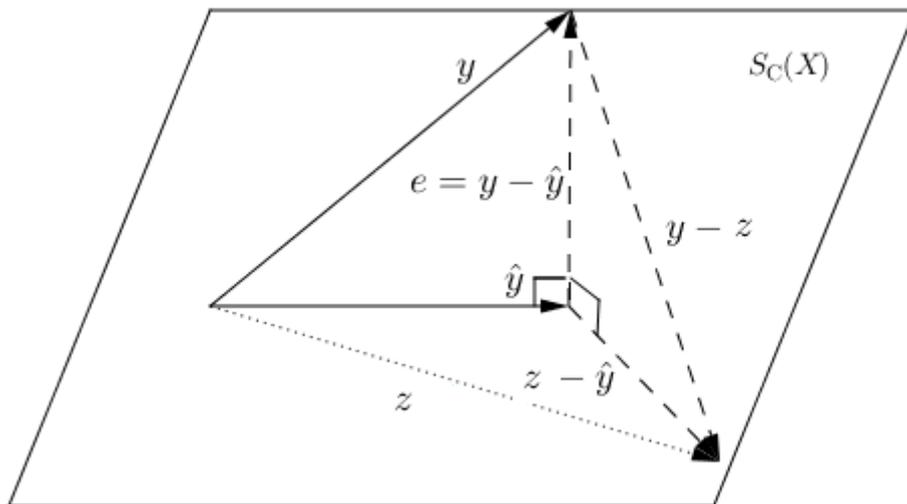


Figura 2.2: Representação geométrica do Teorema 2.2

*Demonstração.* Seja  $z$  um vetor qualquer pertencente a  $S_C(X)$  diferente de  $\hat{y}$ . Conforme Figura 2.2. Como  $z - \hat{y}$  está em  $S_C(X)$  e  $y - \hat{y} = (\hat{y})^\perp$  em  $S_C(X)$ , então  $y - \hat{y}$  é ortogonal a  $z - \hat{y}$ . Além disso  $y - z = (y - \hat{y}) + (\hat{y} - z)$ .

Pelo teorema de Pitágoras, temos  $\|y - z\|^2 = \|y - \hat{y}\|^2 + \|\hat{y} - z\|^2$ , onde  $\|\hat{y} - z\|^2 > 0$ , já que  $\hat{y} - z \neq 0$ .

Então,

$$\|y - z\|^2 \geq \|y - \hat{y}\|^2.$$

Logo,

$$\|y - \hat{y}\| \leq \|y - z\|.$$

Portanto, a projeção ortogonal  $\hat{y}$  é a melhor aproximação de  $y$ . □

## 2.2 Ajuste polinomial pelo método dos mínimos quadrados

Ajustar um conjunto de  $m$  pontos  $\{(x_i, y_i) \mid i = 1, 2, 3, \dots, m\}$  a um polinômio  $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$  pelo método dos mínimos quadrados, con-

siste em minimizar  $E(a_0, a_1, \dots, a_n) = E(\alpha) = \|y - \hat{y}\|^2 = \|e\|^2$  em relação a  $\alpha = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$

para  $\hat{y} = P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$  ou  $\hat{y} = X\alpha$ , de modo a encontrarmos  $a_0, a_1, \dots, a_n$  que nos garanta o ponto de mínimo, isto é, o menor módulo para  $e$ , conforme veremos no Teorema 2.3.

Genericamente, a soma dos quadrados dos desvios é dada por

$$E = \sum_{i=1}^m p_i e_i^2 = p_1 e_1^2 + p_2 e_2^2 + \dots + p_m e_m^2$$

onde  $p_i$  corresponde ao peso associado a cada  $m$ -ésimo ponto. O valor  $p_i$  atribuído a cada ponto está relacionado diretamente à relevância que cada um dos pontos tem nesse processo de ajuste. Assim, um ponto obtido com maior precisão deverá estar associado a um peso maior, e um ponto obtido com menor precisão deverá estar associado um peso menor.

Neste trabalho admitiremos que todos os pontos obtidos tem a mesma relevância, ou que foram determinados com a mesma precisão. O que significa que consideraremos  $p_i = 1$ , para todo  $i$ , tal que  $1 \leq i \leq m$ .

O teorema a seguir nos dá a solução aproximada de mínimos quadrados do sistema  $y = X\alpha$  como a solução do sistema de equações normais  $X^t X \alpha = X^t y$ . Essa denominação

refere-se ao fato de que a equação  $X^t X \alpha = X^t y$  pode ser escrita na forma  $X^t(y - X \alpha) = 0$ , o que indica que os vetores dados pelos resíduos  $y - X \alpha$  são normais (ortogonais) às linhas de  $X^t$ .

**Teorema 2.3.** *Uma condição necessária e suficiente para que  $\alpha_0$  seja solução de mínimos quadrados para o sistema  $X \alpha = y$  inconsistente é que  $\alpha_0$  seja solução do sistema de equações normais  $X^t X \alpha = X^t y$ .*

*Demonstração.* Seja  $\alpha_0$  solução aproximada de mínimos quadrados para  $X \alpha = y$  inconsistente, então temos  $X \alpha_0 = y$ . Multiplicando, pela esquerda, ambos os lados de  $X \alpha_0 = y$  por  $X^t$  obtemos,

$$X^t X \alpha_0 = X^t y.$$

Logo,  $\alpha_0$  é solução de  $X^t X \alpha = X^t y$ .

Conforme os teoremas 1.32 e 1.33, os quais fornecem condições necessárias e suficientes para obtenção de pontos críticos de uma função diferenciável; devemos mostrar que  $E(\alpha)$  satisfaz a tais condições. Como  $E(\alpha)$  é dada por definição por:

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \|e\|^2 \\ &= \|y - X \alpha\|^2 \\ &= \langle y - X \alpha, y - X \alpha \rangle \\ &= \langle y, y \rangle - \langle y, X \alpha \rangle - \langle X \alpha, y \rangle + \langle X \alpha, X \alpha \rangle \\ &= \langle y, y \rangle - \langle y, X \alpha \rangle - \langle y, X \alpha \rangle + \langle X \alpha, X \alpha \rangle \\ &= y^t y - 2y^t X \alpha + \alpha^t X^t X \alpha. \end{aligned}$$

Assim  $E(\alpha)$  é diferenciável pois é linear em  $\alpha$ . Isto implica que  $\frac{\partial E}{\partial \alpha}$  conduz a um extremo de  $E$ . Dos teoremas citados temos que  $\nabla E(\alpha) = 0$  nos leva a estes extremos, ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (y^t X \alpha - 2y^t X \alpha + \alpha^t X^t X \alpha)}{\partial \alpha} &= 0 \\ y^t X - 2y^t X + \alpha^t X^t X &= 0 \\ \alpha^t X^t X - 2y^t X + \alpha^t X^t X &= 0 \\ -2y^t X + 2\alpha^t X^t X &= 0 \end{aligned}$$

Como uma matriz nula tem sua transposta nula, então

$$(-2y^t X + 2\alpha^t X^t X)^t = 0.$$

Donde

$$-2X^t y + 2X^t X \alpha = 0.$$

Portanto,

$$X^t X \alpha = X^t y. \quad (2.3)$$

Ainda precisamos garantir que a solução de mínimos quadrados nos oferece ponto de mínimo. Assim,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{\partial E}{\partial \alpha} \right) = \frac{\partial(-2X^t y + 2X^t X \alpha)}{\partial \alpha} = 2X^t X$$

**Definição 2.4.** Uma matriz  $M$  real de ordem  $n \times n$  é definida positiva se  $v^t M v > 0$  para todos os vetores  $v$ , tal que,  $v \neq 0$  e  $v \in \mathbb{R}^n$

Pela definição acima podemos verificar que  $X^t X$  é uma matriz positiva, isto é, para todo vetor coluna  $v \in \mathbb{R}^n$  não nulo temos que o número  $v^t (X^t X) v > 0$ , ou seja,

$$v^t (X^t X) v = v^t X^t X v = (Xv)^t (Xv) = \|Xv\|^2 > 0,$$

pois,  $v \neq 0$  e  $X \neq 0$ . Portanto, a equação  $X^t X \alpha = X^t y$  determina o ponto de mínimo.

Então, temos que  $\alpha_0$  é solução aproximada de mínimos quadrados de  $X \alpha = y$  inconsistente.

□

Pelo Teorema 2.3 podemos obter a solução  $\alpha_0$  derivando parcialmente a soma dos quadrados dos desvios em relação a cada coeficiente do polinômio, isto é, fazendo  $\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0$ . Assim

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial a_n} = 0 \end{cases}$$

Donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m 2 [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-1) = 0 \\ \sum_{i=1}^m 2 [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-x_i) = 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m 2 [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-x_i^n) = 0 \end{array} \right.$$

Simplificando, obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-1) = 0 \\ \sum_{i=1}^m [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-x_i) = 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m [y_i - (a_n x_i^n + \dots + a_0)] (-x_i^n) = 0 \end{array} \right.$$

Logo,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m [a_n x_i^n + \dots + a_0 - y_i] = 0 \\ \sum_{i=1}^m [a_n x_i^{n+1} + \dots + a_0 x_i - y_i x_i] = 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m [a_n x_i^{2n} + \dots + a_0 x_i^n - y_i x_i^n] = 0 \end{array} \right.$$

Como  $\sum_{i=1}^n (a_i + b_i) = a_1 + b_1 + \dots + a_n + b_n = a_1 + \dots + a_n + b_1 + \dots + b_n = \sum_{i=1}^n a_i + \sum_{i=1}^n b_i$

e para todo  $k$  real  $\sum_{i=1}^n k a_i = k a_1 + \dots + k a_n = k(a_1 + \dots + a_n) = k \sum_{i=1}^n a_i$ , podemos dizer que esse último sistema pode ser escrito da forma

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 \sum_{i=1}^m x_i^0 + \dots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^n - \sum_{i=1}^m y_i = 0 \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i^1 + \dots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} - \sum_{i=1}^m y_i x_i = 0 \\ \vdots \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i^n + \dots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{2n} - \sum_{i=1}^m y_i x_i^n = 0 \end{array} \right.$$

Isso nos dá  $n + 1$  equações normais com  $n + 1$  incógnitas  $a_j$ , com  $j = 0, 1, \dots, n$ .  
Que escrevemos como

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 \sum_1^m x_i^0 + a_1 \sum_1^m x_i^1 + \dots + a_n \sum_1^m x_i^n = \sum_1^m y_i x_i^0 \\ a_0 \sum_1^m x_i^1 + a_1 \sum_1^m x_i^2 + \dots + a_n \sum_1^m x_i^{n+1} = \sum_1^m y_i x_i^1 \\ \vdots \\ a_0 \sum_1^m x_i^n + a_1 \sum_1^m x_i^{n+1} + \dots + a_n \sum_1^m x_i^{2n} = \sum_1^m y_i x_i^n \end{array} \right. \quad (2.4)$$

Escrevendo (2.4) na forma matricial, temos

$$\begin{bmatrix} m & \sum_1^m x_i & \dots & \sum_1^m x_i^n \\ \sum_1^m x_i & \sum_1^m x_i^2 & \dots & \sum_1^m x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_1^m x_i^n & \sum_1^m x_i^{n+1} & \dots & \sum_1^m x_i^{2n} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_1^m y_i \\ \sum_1^m y_i x_i^1 \\ \vdots \\ \sum_1^m y_i x_i^n \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Portanto, a solução  $\alpha_0 = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$  de mínimos quadrados pode ser encontrada mini-

zando os desvios e resolvendo o sistema (2.5) que corresponde à equação  $X^t X \alpha = X^t y$ .

**Teorema 2.5.** *O erro e devido à aproximação de mínimos quadrados é ortogonal às colunas da matriz  $X$ .*

*Demonstração.* Seja  $e = y - \hat{y}$  e  $X^t X \alpha = X^t y$ . Então,

$$X^t y = X^t X \alpha \Leftrightarrow X^t (y - X \alpha) = 0 \Leftrightarrow X^t (y - \hat{y}) = 0 \Leftrightarrow X^t e = 0$$

Logo,  $e \in N(X^t)$  e pelo Teorema 1.30  $N(X^t) = [S_C(X)]^\perp$ , isto é,  $e$  é ortogonal às colunas de  $X$ , ou seja,  $e$  é ortogonal a  $\hat{y}$ , e  $\hat{y}$  é a projeção ortogonal de  $y$  em  $S_C X$ .  $\square$

Pelo Teorema 2.5 acima, garantimos que a equação  $X^t X \alpha = X^t y$  nos oferece a solução com o menor desvio. Precisamos verificar se a equação  $X^t X \alpha = X^t y$  sempre admite solução, ou seja, se o sistema (2.5) é possível e determinado, para isso mostraremos, pelo teorema a seguir, que a matriz  $X^t X$  é inversível se e só se as colunas de  $X$  são linearmente independentes.

**Teorema 2.6.** *A matriz  $X^tX$  é inversível se, e somente se, as colunas de  $X$  são linearmente independentes. Nesse caso, a equação  $X\alpha = y$  tem apenas uma solução de mínimos quadrados dada por  $\alpha = (X^tX)^{-1}X^ty$ .*

*Demonstração.* Primeiro mostraremos que se  $X^tX$  é inversível, então as colunas de  $X$  são linearmente independentes. De fato, seja  $\alpha$  uma solução de  $X\alpha = 0$ , então  $X^tX\alpha = X^t0$  implica em  $X^tX\alpha = 0$ . Como  $X^tX$  é inversível, então  $\alpha = 0$ . Portanto,  $X\alpha = 0$  admite somente solução trivial, isto é, os vetores coluna de  $X$  são linearmente independentes.

Agora provaremos que se os vetores coluna de  $X_{m \times n}$  são linearmente independentes então  $X^tX$  é inversível.

Assim, suponhamos que  $X$  possua vetores colunas linearmente independentes. Observe que  $X^tX$  possui ordem  $n \times n$ , logo mostrar que  $X^tX$  é inversível pode ser feito mostrando que  $X^tX$  é linearmente independente, ou que,  $X^tX\alpha$  possui somente a solução trivial.

Pelo Teorema 2.3 a solução de  $X^tX\alpha = 0$  coincide com solução de  $X\alpha = 0$ , como  $X$  tem vetores coluna linearmente independentes, resulta em  $\alpha = 0$ . Portanto,  $X^tX$  é inversível.

□

## 2.3 Grau do polinômio no ajuste

Discutiremos nesta seção como definir o grau do polinômio  $P_n(x) = a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0$  que melhor se ajusta ao conjunto de dados.

Considere o polinômio  $P_n(x)$  e  $(x_i, y_i)$  com  $1 \leq i \leq m$ . Analisemos as seguintes situações:

1. Se quisermos um polinômio de grau  $n \geq m$  precisaremos de  $n + 1$  equações, assim o número de coeficientes  $a_i$ , com  $0 \leq i \leq n$ , a serem calculados será maior que o número de equações independentes estabelecidas pelos  $m$  pontos, logo não teríamos como calcular os  $a_i$ .
2. Se desejarmos  $P_n(x)$  com grau  $m - 1$ , teoricamente teríamos um ajuste perfeito, uma vez que a curva passaria por todos os pontos, o que nos daria um desvio nulo e a proposta de mínimos quadrados não teria sentido, neste caso, o processo corresponderia a uma interpolação<sup>1</sup>. Além disso, um polinômio com grau  $n = m - 1$  não teria sentido para dados experimentais, uma vez que os dados estão sujeitos a desvios e incertezas que decorrem da precisão de instrumentos, habilidade de quem coleta os

<sup>1</sup>Interpolação é um método que tem como objetivo construir uma função real  $f$  para todos os pontos experimentais  $((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m))$  de modo que  $f(x_1) = y_1, f(x_2) = y_2 \dots f(x_m) = y_m$ , ou seja, a função interpolada passa por todos os pontos do conjunto considerado.

dados, entre outros [14]. Mais ainda, a função passar em todos os pontos não garante maior precisão na determinação de dados não tabelados.

Portanto, o grau de  $P_n(x)$  tem que satisfazer à condição  $n < m - 1$ . Satisfeita essa exigência, “um critério que surge naturalmente é aumentar sistematicamente o valor de  $n$  até estabelecer qual é o polinômio de menor grau que garante que o erro cometido no ajuste” seja o menor possível [14].

## 2.4 Qualidade do ajuste

Avaliar o poder descritivo da função ajustada é um procedimento necessário, já que aplicamos o Método de Mínimos Quadrados na intenção de construir um modelo que explique o fenômeno em estudo. Para isso, alguns critérios são utilizados para avaliar a qualidade do ajuste proposto. Dentre os quais, temos a análise de resíduos e o coeficiente de determinação  $R^2$ .

A análise dos resíduos  $e_i = y_i - \hat{y}_i$  se constitui um bom método para avaliação do modelo. De forma intuitiva, percebe-se que o ajuste mais adequado é aquele que distribui os resíduos mais próximos de zero, ou seja, o melhor ajuste é aquele que faz com que os resíduos  $(y_i - \hat{y}_i)$  tendam a zero. A partir da Figura 2.2 e do Teorema 2.2, tomando  $z = \bar{y}$  ( $\bar{y}$  sendo a média de  $y_i$ ), o coeficiente de determinação  $R^2$  é interpretado como o quadrado do cosseno do ângulo entre os vetores  $y - \bar{y}$  e  $\hat{y} - \bar{y}$ . Assim sendo,

$$R^2 = \frac{\|\hat{y}_i - \bar{y}\|^2}{\|y_i - \bar{y}\|^2}. \quad (2.6)$$

Ainda pela interpretação da Figura 2.2 temos que  $\|y - \bar{y}\|^2 = \|y - \hat{y}\|^2 + \|\hat{y} - \bar{y}\|^2$ .

Daí,

$$R^2 = \frac{\|\hat{y}_i - \bar{y}\|^2}{\|y_i - \bar{y}\|^2} = 1 - \frac{\|y_i - \hat{y}_i\|^2}{\|y_i - \bar{y}\|^2}. \quad (2.7)$$

Portanto, a qualidade de um ajuste avaliado pelo coeficiente de determinação  $R^2$  é tal que  $0 \leq R^2 \leq 1$  e quanto mais próximo de zero estiver  $\|e\|$ , mais próximo de 1 estará  $R^2$ .

## 2.5 Exemplo: Ajuste linear

Apresentaremos um exemplo para melhor compreensão do método exposto na seção anterior e vamos avaliar a qualidade de seu ajuste, utilizando a Equação (2.7).

Consideremos para um ajuste linear (ajuste polinomial de grau 1) os dados abaixo:

$i$	1	2	3	4	5
$x_i$	0	0,25	0,50	0,75	1,00
$y_i$	1,0000	1,2840	1,6487	2,1170	2,7183

Tabela 2.1: Coordenadas do ponto  $(x_i, y_i)$

Deste modo, dada a função polinomial  $\hat{y}_i = a_1x_i + a_0$ , iremos minimizar a soma do quadrado dos desvios  $E(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m (y_i - a_1x_i - a_0)^2$  que é obtido derivando a expressão em relação aos parâmetros  $a_1$  e  $a_0$ . Assim,

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \end{cases}$$

Donde,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m 2(y_i - (a_1x_i + a_0))(-1) = 0 \\ \sum_{i=1}^m 2(y_i - (a_1x_i + a_0))(-x_i) = 0 \end{cases}$$

Simplificando o sistema acima, obtemos

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m (y_i - (a_1x_i + a_0))(-1) = 0 \\ \sum_{i=1}^m (y_i - (a_1x_i + a_0))(-x_i) = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \sum_{i=1}^m (a_1x_i + a_0 - y_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^m (a_1x_i^2 + a_0x_i - x_iy_i) = 0 \end{cases}$$

Aplicando as propriedades de somatório, temos

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m a_1x_i + \sum_{i=1}^m a_0 - \sum_{i=1}^m y_i = 0 \\ \sum_{i=1}^m a_1x_i^2 + \sum_{i=1}^m a_0x_i - \sum_{i=1}^m x_iy_i = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \sum_{i=1}^m a_1x_i + \sum_{i=1}^m a_0 = \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m a_1x_i^2 + \sum_{i=1}^m a_0x_i = \sum_{i=1}^m x_iy_i \end{cases}$$

Daí,

$$\begin{cases} m \cdot a_0 + a_1 \sum_{i=1}^m x_i = \sum_{i=1}^m y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 = \sum_{i=1}^m x_iy_i \end{cases} \quad (2.8)$$

Isolando  $a_0$  na primeira equação do sistema 2.8, temos

$$a_0 = \frac{\sum_1^m y_i}{m} - a_1 \frac{\sum_1^m x_i}{m} = \bar{y} - a_1 \bar{x}. \quad (2.9)$$

Substituindo  $a_0$  na segunda equação do sistema 2.8 e simplificando, obtemos

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\sum_1^m y_i}{m} - a_1 \frac{\sum_1^m x_i}{m} \right) \sum_1^m x_i + a_1 \sum_1^m x_i^2 = \sum_1^m x_i y_i \\ & \frac{\sum_1^m x_i \sum_1^m y_i}{m} - \frac{a_1 \left( \sum_1^m x_i \right)^2}{m} + a_1 \sum_1^m x_i^2 = \sum_1^m x_i y_i \\ & a_1 \left[ \sum_1^m x_i^2 - \frac{\left( \sum_1^m x_i \right)^2}{m} \right] = \sum_1^m x_i y_i - \frac{\sum_1^m x_i \sum_1^m y_i}{m} \end{aligned}$$

Portanto,

$$a_1 = \frac{\sum_1^m x_i y_i - \frac{\sum_1^m x_i \sum_1^m y_i}{m}}{\sum_1^m x_i^2 - \frac{\left( \sum_1^m x_i \right)^2}{m}} \quad (2.10)$$

Usando os dados da Tabela 2.1 construímos a tabela abaixo.

Substituindo os valores encontrados em (2.10), teremos

$i$	$x_i$	$y_i$	$x_i^2$	$x_i y_i$
1	0	1,0000	0	0
2	0,25	1,2840	0,625	0,321
3	0,50	1,6487	0,25	0,82435
4	0,75	2,1170	0,5625	1,58775
5	1,00	2,7183	1	2,7183
	$\sum_1^5 x_i = 2,5$	$\sum_1^5 y_i = 8,768$	$\sum_1^5 x_i^2 = 1,875$	$\sum_1^5 x_i y_i = 5,4514$

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \frac{5,4514 - \frac{2,5 \cdot 8,768}{5}}{1,875 - \frac{(2,5)^2}{5}} \\
 &= \frac{1,0674}{0,625} \\
 &= 1,70784.
 \end{aligned}$$

A partir das médias  $\bar{x} = \frac{\sum_1^m x_i}{m} = \frac{2,5}{5} = 0,5$  e  $\bar{y} = \frac{\sum_1^m y_i}{m} = \frac{8,768}{5} = 1,7536$ , juntamente com o valor de  $a_1$ , em (2.9), encontramos

$$a_0 = 1,7536 - 1,70784 \cdot 0,5 = 0,8997.$$

Logo, o modelo ajustado aos pontos da Tabela 2.1 é dado por

$$\hat{y}_i = 1,70784x_i + 0,8997. \quad (2.11)$$

Abaixo, determinamos as estimativas para o cálculo do  $R^2$ .

$i$	$y_i$	$\hat{y}_i$	$y_i - \hat{y}_i$	$y_i - \bar{y}$
1	1,0000	0,8997	0,1003	-0,8539
2	1,2840	1,32666	-0,04266	-0,42694
3	1,6487	1,75362	-0,10492	0,00002
4	2,1170	2,18058	0,06358	0,42698
5	2,7183	2,60754	0,11076	0,85394

Usando a Equação (2.7), o coeficiente de determinação é dado por

$$R^2 = 1 - \frac{\|(0,1003; -0,04266; -0,10492; 0,06358; 0,11076)\|^2}{\|(-0,8539; -0,42694; 0,00002; 0,42698; 0,85394)\|^2} = 0,9789. \quad (2.12)$$

Esse valor revela que a função  $\hat{y}_i = 1,70784x_i + 0,8997$  admite um bom ajuste do conjunto de dados em questão, já que, quanto mais próximo de 1 estiver o coeficiente de determinação, melhor a qualidade do ajuste, ou seja, maior a capacidade da função em descrever os dados e fazer estimativas.

### 2.5.1 Uma outra abordagem do problema

Podemos resolver o problema anterior usando o sistema de equações normais dado no Teorema 2.3.

Deste modo, para cada ponto da Tabela 2.1 e admitindo o mesmo tipo de ajuste  $\hat{y}_i = a_1x_i + a_0$ , temos o sistema de equações:

$$\begin{cases} a_1 0 + a_0 = 1,0000 \\ a_1 0,25 + a_0 = 1,2840 \\ a_1 0,50 + a_0 = 1,6487 \\ a_1 0,75 + a_0 = 2,1170 \\ a_1 1,00 + a_0 = 2,7183, \end{cases}$$

que na forma matricial  $X\alpha = y$  pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0,25 & 1 \\ 0,50 & 1 \\ 0,75 & 1 \\ 1,00 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,0000 \\ 1,2840 \\ 1,6487 \\ 2,1170 \\ 2,7183 \end{bmatrix}.$$

Pelo Teorema 2.3 temos que resolver a equação  $X^t X \alpha = X^t y$ , então

$$\begin{bmatrix} 0 & 0,25 & 0,50 & 0,75 & 1,00 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0,25 & 1 \\ 0,50 & 1 \\ 0,75 & 1 \\ 1,00 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,0000 \\ 1,2840 \\ 1,6487 \\ 2,1170 \\ 2,7183 \end{bmatrix}.$$

Multiplicando as matrizes acima, obtemos

$$\begin{bmatrix} 1,875 & 2,5 \\ 2,5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,4514 \\ 8,7680 \end{bmatrix}.$$

Observe que esse sistema corresponde ao apresentado em (2.8), de modo que podemos resolvê-lo usando os mesmos procedimentos, isto é

$$\begin{bmatrix} 1,875 & 2,5 \\ 2,5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,4514 \\ 8,7680 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 1,875a_1 + 2,5a_0 = 5,4514 \\ 2,5a_1 + 5a_0 = 8,7680 \end{cases}.$$

A primeira equação nos dá

$$a_0 = \frac{5,4517 - 1,875a_1}{2,5}.$$

Substituindo  $a_0$  na segunda equação e simplificando, encontramos

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{8,7680 - 10,9028}{-1,25} \\ &= \frac{-2,1348}{-1,25} \\ &= 1,70784. \end{aligned}$$

Portanto  $a_0 = 0,8997$ .

Assim, a função ajustada, equivalente a (2.11), é dada por

$$\hat{y}_i = 1,70784x_i + 0,8997. \quad (2.13)$$

A medição da qualidade do ajuste admitindo essa metodologia para definição da função é a mesma usada no processo de minimização de  $E(\alpha)$ .

Outra forma de avaliar a qualidade do ajuste é analisar a dispersão dos pontos junto à função definida no ajuste, como mostra a Figura 2.3.

Observe que a Figura 2.3 mostra os pontos do conjunto de dados próximos ao gráfico da função ajustada. Isto significa que os desvios  $y_i - \hat{y}_i$  têm módulos pequenos, reforçando o grau de qualidade do ajuste como é indicado pelo coeficiente de determinação.

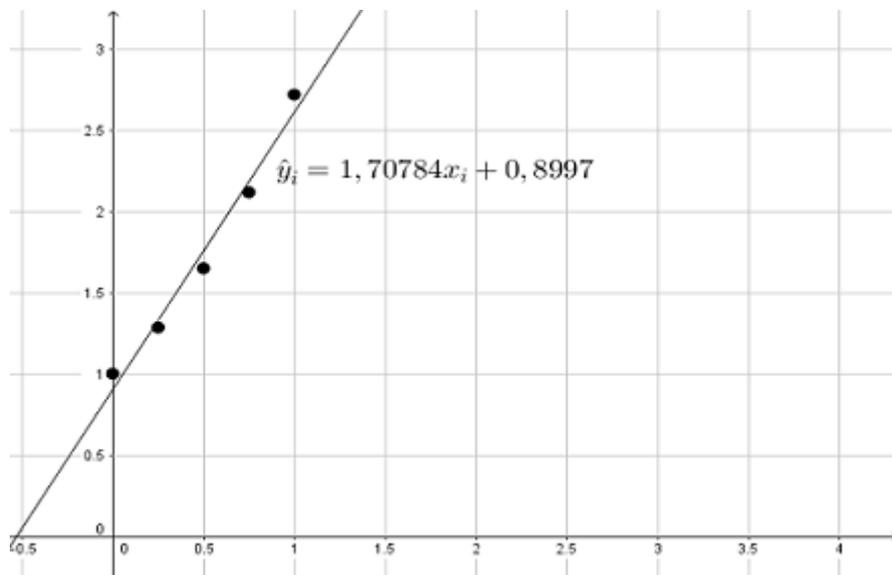


Figura 2.3: Ajuste dos pontos

## Capítulo 3

# Problema: tensão $\times$ deformação

### 3.1 Contexto do problema

As propriedades mecânicas dos materiais e as condições sob as quais serão submetidos são fatores importantes para construir produtos mais seguros e mais duradouros. A tecnologia envolvendo o aprimoramento das ligas metálicas é cada vez mais crescente, haja vista que é possível encontrar uma variedade muito rica de materiais para uma única aplicação, podendo existir uma combinação que traga melhor custo benefício.

Os aços carbono são os aços mais utilizados na fabricação de engrenagens, eixos, pinos, catracas e outros, apresentando bom custo benefício em relação a outros materiais com o mesmo propósito e possui grande utilidade na indústria automobilística e máquinas em geral. Por estes motivos, os aços carbono são um dos mais fabricados, tendo uma grande variedade de aplicações, sendo submetidos a muitas investigações que procuram descrever suas propriedades e desenvolver seus potenciais produtivos.

Dentre as metodologias de estudo das propriedades mecânicas dos materiais a técnica de medição por imagem é uma das mais importante. Além de recursos visuais, como máquinas ou filmadoras, ela admite o uso de recursos computacionais e dinâmicas específicas para garantia da confiabilidade da inspeção. A medição por imagem é uma técnica muito conveniente em experimentos onde não há contato físico com a amostra, muito comum em altas temperaturas ou em análise de deformidades muito pequenas[1].

O projeto de pesquisa [2] iniciado em 2016 estudou a resistência à tração do aço carbono *SAE1020*. Experimentos dessa natureza admitem como variáveis a tensão fornecida na liga e sua deformação, sendo realizados em equipamentos universais para o referido teste, conforme Figura 3.1. Foi gerado nesse estudo um conjunto de pontos que relacionam a deformação da liga a partir da tensão fornecida. Esses pontos gerados serão os dados que utilizaremos para aplicação do método de mínimos quadrados.



Figura 3.1: Máquina universal de ensaio de tração - Marca EMIC, modelo DL 3000

## 3.2 Descrição do experimento

A representação da relação Tensão ( $\sigma$ )  $\times$  Deformação ( $\varepsilon$ ) é normalmente expressa pelos pontos ( $\varepsilon, \sigma$ ) no plano, onde a deformação é expressa no eixo das abscissas e a tensão no eixo das ordenadas. A tensão é definida pela razão entre a força  $F$  aplicada à liga e sua área  $A$  da secção transversal,  $\frac{F}{A}$ , usualmente em  $MPa$  -Mega Pascal. A deformação é dada pela razão entre a variação do comprimento (diferença do comprimento final  $L_i$  pelo comprimento inicial  $L_0$ ) e o comprimento inicial,  $\frac{L_i - L_0}{L_0}$ , em unidade adimensional, escrita como porcentagem ou fração centesimal.

A relação tensão $\times$ deformação de um certo material é obtida a partir de ensaios de tração que são realizados utilizando corpos de prova (ver Figura 3.2) do mesmo material. Neste tipo de ensaio, as extremidades de um corpo de prova são fixadas por garras ligadas a um dispositivo tracionador. Uma das garras é fixa e a outra é móvel, deslocando-se com velocidade constante. Se a carga aplicada for suficientemente pequena, a deformação de qualquer corpo sólido será inteiramente elástica. Um sólido deformado elasticamente retornará à sua forma original assim que for retirada a carga. Entretanto, se a carga for grande, o material pode ser deformado permanentemente [23].

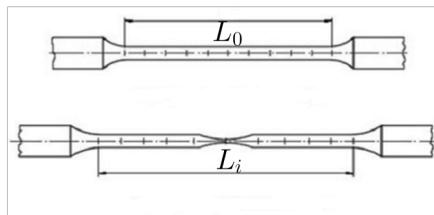


Figura 3.2: Modelo de um corpo de prova para ensaio de tração

Segundo Silva [23] a fase inicial da relação tensão  $\times$  deformação que é reversível após retirada da carga é chamada de elástica, e o resto da curva, que representa a forma em que os sólidos sofrem deformação permanente, é chamada de plástica. Em alguns sólidos existe um caso intermediário, quando o sólido não se restabelece totalmente após a retirada da carga. Esse comportamento é chamado de anelástico e pode ser entendido como a região de transição entre a parte elástica e a parte plástica, denominada também de região de escoamento, que em geral nos metais são muito pequenas e difíceis de serem identificadas. Tradicionalmente as curvas em ligas metálicas admitem o contorno, descritos nas Figuras 3.3 e 3.4 [11].

Ainda segundo Silva [23] a região elástica obedece a lei de Hooke, ou seja, a relação tensão  $\times$  deformação admite um comportamento linear, enquanto a região plástica não tem um comportamento definido. Entretanto, segundo a **ABNT NBR 6892 – 1**, tal região pode ser ajustada a uma função polinomial .

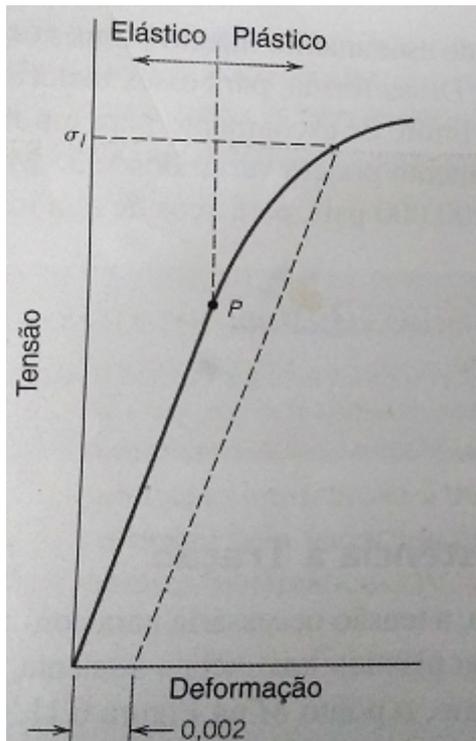


Figura 3.3: Comportamento tensão-deformação típico de um metal, mostrando as deformações elástica e plástica, o limite de proporcionalidade P e o limite de escoamento  $\sigma_1$ , determinado usando o método da pré-deformação de 0,002.

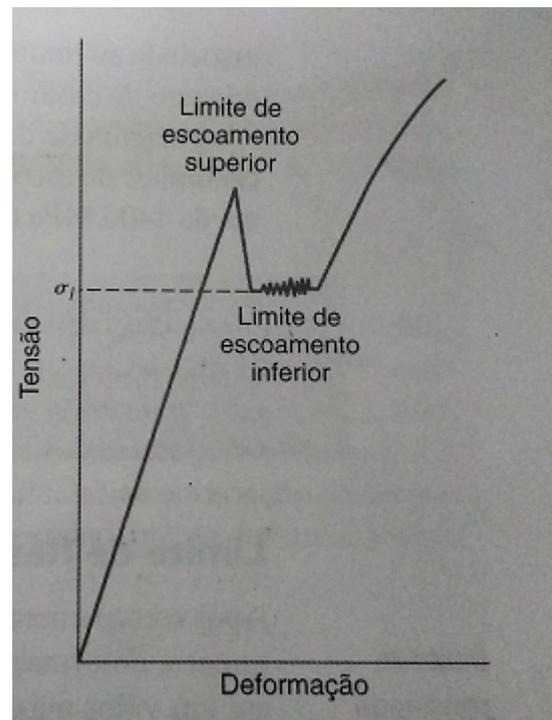


Figura 3.4: Comportamento, tensão-deformação, esquemático encontrado em alguns aços que apresentam o fenômeno do limite de escoamento superior.

### 3.3 Ajuste Polinomial dos dados tensão $\times$ deformação

Os dados descritos pelo experimento de tensão  $\times$  deformação no aço carbono *SAE1020* apresentados na Tabela 3.1 serão utilizados, através do Método de Mínimos Quadrados, para determinar a função polinomial que melhor se ajusta a eles. Em seguida, avaliaremos a qualidade da função pelo coeficiente de determinação e seu comportamento em relação à distribuição de pontos.

Veja na Tabela 3.1 que os dados possuem seis casas decimais, da mesma forma, os resultados das operações envolvendo esses números irão possuir uma aproximação de seis casas decimais. Os arredondamentos irão seguir a **ABNT NBR**. Isto é, quando o algarismo imediatamente seguinte ao último algarismo conservado <sup>1</sup> for menor que 5, o último algarismo conservado não terá modificação, caso o algarismo seguinte ao último

<sup>1</sup>É o algarismo significativo da medida

algarismo conservado seja maior que 5, o último algarismo terá o acréscimo de uma unidade. Se o algarismo imediatamente seguinte ao último algarismo conservado for igual 5, o último algarismo conservado terá o acréscimo de uma unidade, caso ele seja par e não sofrerá alteração caso seja ímpar.

Foto	Tensão	Deformação
1	0,0000	0,0000
2	98,997581	0,011451
3	168,635721	0,019084
4	216,435341	0,026718
5	315,544342	0,040076
6	388,766526	0,082062
7	402,879855	0,091604
8	411,496415	0,097329
9	417,735992	0,103054
10	423,659877	0,106870
11	427,503902	0,112596
12	430,995094	0,114505
13	434,801979	0,120229
14	437,457513	0,124047
15	440,038767	0,127864
16	445,071283	0,139313
17	447,188283	0,141222
18	449,416703	0,148856
19	450,995168	0,167940
20	443,919933	0,188932
21	397,940190	0,208016

Tabela 3.1: Dados gerados pelo ensaio de tração utilizando medição por processamento digital de imagem.

Na Figura 3.5 está representado o gráfico de dispersão das variáveis tensão  $\times$  deformação, cujos dados utilizados são os da Tabela 3.1. Observe que no ponto  $E$  é indicado o limite de elasticidade, que pode ser entendido como último ponto associado a deformação elástica e a partir de onde se inicia a transição para a deformação plástica no fenômeno. Além disso, no ponto  $U$  é indicado a tensão de ruptura, ponto onde a liga se rompe.

Veja que a distribuição dos pontos no plano indica um ajuste para uma função com grau  $n \geq 2$ . A própria curvatura da sequência de pontos sugere o contorno de uma parábola. Desta forma, a função a ser modelada ao conjunto de pontos admitirá a forma  $\hat{y}_i = P_2(x) = a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0$ . Logo, determinaremos os valores de  $a_2$ ,  $a_1$  e  $a_0$

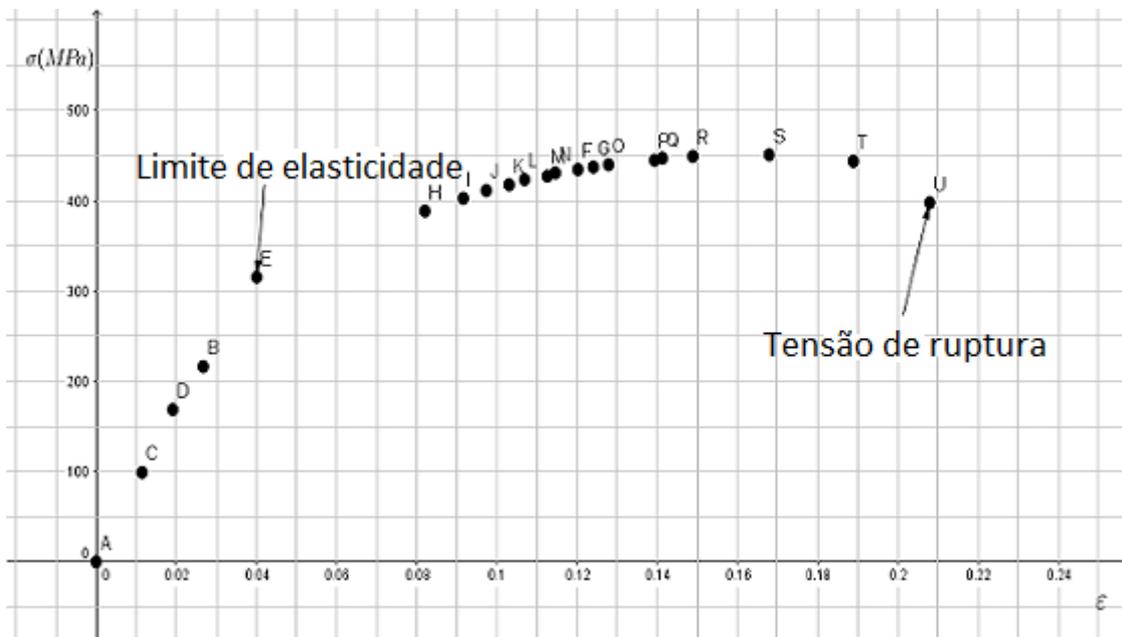


Figura 3.5: Gráfico de dispersão Tensão×Deformação

da função  $P_2(x)$  que minimizam os quadrados dos desvios, isto é, minimizaremos a função

$$E(\alpha) = E(a_2, a_1, a_0) = \sum_1^{21} [y_i - (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0)]^2 \text{ em relação aos parâmetros } a_2, a_1 \text{ e } a_0.$$

Portanto,

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a_2} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial a_0} = 0 \end{cases}$$

Donde,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{21} 2 (y_i - (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0)) (-x_i^2) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} 2 (y_i - (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0)) (-x_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} 2 (y_i - (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0)) (-1) = 0 \end{cases}$$

Simplificando o sistema, temos

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{21} (y_i - (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0)) (-x_i^2) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} (y_i - (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0)) (-x_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} (y_i - (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0)) (-1) = 0 \end{array} \right.$$

Logo,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{21} (a_2x_i^4 + a_1x_i^3 + a_0x_i^2 - y_ix_i^2) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} (a_2x_i^3 + a_1x_i^2 + a_0x_i - y_ix_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0 - y_i) = 0 \end{array} \right.$$

Aplicando as propriedades de soma de séries, obtemos,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^4 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i^3 + \sum_{i=1}^{21} a_0x_i^2 - \sum_{i=1}^{21} y_ix_i^2 = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^3 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i^2 + \sum_{i=1}^{21} a_0x_i - \sum_{i=1}^{21} y_ix_i = 0 \\ \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^2 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i + \sum_{i=1}^{21} a_0 - \sum_{i=1}^{21} y_i = 0 \end{array} \right.$$

Donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^4 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i^3 + \sum_{i=1}^{21} a_0x_i^2 = \sum_{i=1}^{21} y_ix_i^2 \\ \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^3 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i^2 + \sum_{i=1}^{21} a_0x_i = \sum_{i=1}^{21} y_ix_i \\ \sum_{i=1}^{21} a_2x_i^2 + \sum_{i=1}^{21} a_1x_i + \sum_{i=1}^{21} a_0 = \sum_{i=1}^{21} y_i \end{array} \right.$$

Portanto,

$$\left\{ \begin{array}{l} a_2 \sum_{i=1}^{21} x_i^4 + a_1 \sum_{i=1}^{21} x_i^3 + a_0 \sum_{i=1}^{21} x_i^2 = \sum_{i=1}^{21} y_i x_i^2 \\ a_2 \sum_{i=1}^{21} x_i^3 + a_1 \sum_{i=1}^{21} x_i^2 + a_0 \sum_{i=1}^{21} x_i = \sum_{i=1}^{21} y_i x_i \\ a_2 \sum_{i=1}^{21} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{21} x_i + 21a_0 = \sum_{i=1}^{21} y_i \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Deste modo, resolver o sistema (3.1) associado às incógnitas  $a_2, a_1$  e  $a_0$ , consiste no principal problema na determinação da função  $P_2(x) = a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0$ . A Tabela 3.2 mostra todos os valores das somas acima calculados com os dados da Tabela 3.1.

$i$	$y_i$	$x_i$	$x_i^2$	$x_i^3$	$x_i^4$	$y_i x_i$	$y_i x_i^2$
1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2	98,997580	0,011451	0,000131	0,000001	0,000000	1,133621	0,012981
3	168,635721	0,019084	0,000364	0,000007	0,000000	3,218243	0,061417
4	216,435341	0,026718	0,000713	0,000021	0,000000	5,977510	0,165086
5	315,544342	0,040076	0,001606	0,000064	0,000003	12,645753	0,506791
6	388,766526	0,082062	0,006734	0,000552	0,000045	31,902956	2,618020
7	402,879855	0,091604	0,008391	0,000769	0,000070	36,905410	3,380683
8	411,496415	0,097329	0,009472	0,000922	0,000089	40,050533	3,898078
9	417,735992	0,103054	0,010620	0,001094	0,000113	43,049365	4,436409
10	423,659877	0,106870	0,011421	0,001220	0,000130	45,276533	4,838703
11	427,503902	0,112596	0,012677	0,001427	0,000161	48,135229	5,419834
12	430,995094	0,114505	0,013111	0,001501	0,000172	49,351093	5,650947
13	434,801979	0,120229	0,014455	0,001737	0,000209	52,275809	6,285068
14	437,457513	0,124047	0,015387	0,001908	0,000236	54,265290	6,731446
15	440,038767	0,127864	0,016349	0,002090	0,000267	56,265121	7,194283
16	445,071283	0,139313	0,019408	0,002703	0,000376	62,004218	8,637993
17	447,188283	0,141222	0,019943	0,002816	0,000397	63,152826	8,918568
18	449,416703	0,148856	0,022158	0,003298	0,000491	66,898372	9,958224
19	450,995168	0,167940	0,028203	0,004736	0,000795	75,740133	12,719798
20	443,919933	0,188932	0,035695	0,006744	0,001274	83,870674	15,845854
21	397,940190	0,208016	0,043270	0,009001	0,001872	82,777928	17,219134
$\sum_{i=1}^{21}$	7649,480464	2,171769	0,290164	0,042618	0,006705	914,896626	124,499322

Tabela 3.2: Estimativas para construção do sistema 3.1

Assim, o sistema apresentado em 3.1 pode ser escrito como,

$$\left\{ \begin{array}{l} 0,006705a_2 + 0,042618a_1 + 0,290164a_0 = 124,499322 \\ 0,042618a_2 + 0,290164a_1 + 0,290164a_0 = 914,896626 \\ 0,290164a_2 + 0,290164a_1 + 21a_0 = 7649,480464 \end{array} \right.$$

Resolvendo o sistema <sup>2</sup>, temos

$$\alpha = \begin{bmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -18518,964049 \\ 5450,024602 \\ 56,515958 \end{bmatrix}.$$

Logo, a função quadrática ajustada é dada por

$$P_2(x) = -18518,964049x^2 + 5450,024602x + 56,515958.$$

Determinada a melhor função quadrática que representa os 21 pontos, podemos então medir a qualidade do ajuste dado pelo polinômio usando a relação (2.7). Para tanto, tomemos

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{21} y_i}{21} = \frac{7649,480464}{21} = 364,260974,$$

e os valores

$$\|y_i - \hat{y}_i\|^2 = \sum_{i=1}^{21} (y_i - \hat{y}_i)^2 = 10718,923039,$$

e

$$\|y_i - \bar{y}\|^2 = \sum_{i=1}^{21} y_i - \bar{y}_i = 336447,211862,$$

da Tabela 3.3.

Logo,

$$R^2 = 1 - \frac{\|y_i - \hat{y}_i\|^2}{\|y_i - \bar{y}\|^2} = 1 - \frac{10718,923039}{336447,211862} = 0,968141. \quad (3.2)$$

O valor encontrado em (3.2) para o coeficiente de determinação é significativo, isto é, o poder explicativo do modelo ajustado representa 96,8141% dos dados.

Outra forma de avaliar o ajuste é a partir da dispersão dos dados em relação à função ajustada como podemos ver na Figura 3.6.

Note que os desvios da função ajustada em relação aos pontos apresentam dispersão relativamente grande, em especial nos primeiros cinco pontos, onde representa a parte elástica do problema deformação  $\times$  tensão. Situação que pode ser observada na Tabela 3.3, onde os desvios  $y_i - \hat{y}_i$  chegam a 70MPa.

O ajuste de 0,968141 dado pelo coeficiente de determinação satisfaz as necessidades de representação dos dados, mas existe a possibilidade de ajustar os dados a outros polinômios que supostamente possam trazer melhores resultados. Inicialmente pode-se

---

<sup>2</sup>Métodos sobre como resolver um sistema podem ser encontrados em [9], [17], [10].

$i$	$y_i$	$\hat{y}_i$	$y_i - \hat{y}_i$	$y_i - \bar{y}$	$(y_i - \hat{y}_i)^2$	$(y_i - \bar{y})^2$
1	0,0000	56,515957	-56,515957	-364,260974	3194,053396	0,000000
2	98,997581	115,953202	-16,955602	-265,263374	287,492439	1,133621
3	168,635721	153,783324	14,852376	-195,625274	220,593073	3,218243
4	216,435341	188,018264	28,417036	-147,825674	807,527935	5,977510
5	315,544342	245,189687	70,354613	-48,716674	4949,771570	12,645753
6	388,766526	379,049172	9,717328	24,505526	94,426463	31,902956
7	402,879855	400,367383	2,512517	38,618962	6,312742	36,905410
8	411,496415	411,531255	-0,034855	47,235426	0,001215	40,050533
9	417,735992	421,491394	-3,755394	53,475026	14,102984	43,049365
10	423,659877	427,454998	-3,795098	59,398926	14,402769	45,276533
11	427,503902	435,383501	-7,879601	63,242926	62,088112	48,135229
12	430,995094	437,768886	-6,773786	66,734126	45,884177	49,351093
13	434,801979	444,075340	-9,273340	70,541026	85,994847	52,275809
14	437,457513	447,623859	-10,166359	73,196526	103,355485	54,265290
15	440,038767	450,611359	-10,572559	75,777826	111,779025	56,265121
16	445,071283	456,359180	-11,287880	80,810326	127,416235	62,004218
17	447,188283	456,855631	-9,667331	82,927326	93,45289	63,152826
18	449,416703	457,441614	-8,024914	85,155726	64,399245	66,898372
19	450,995168	449,484227	1,510973	86,734226	2,283094	75,740133
20	443,919933	425,165583	18,754317	79,658926	351,724406	83,870674
21	397,940190	388,892700	9,047500	33,679226	81,857256	1134,290264
$\sum_{i=1}^{21}$					10718,923039	336447,211862

Tabela 3.3: Estimativas para o cálculo do coeficiente de determinação

pensar em aumentar o grau do polinômio sistematicamente, mas isso é algo que tornaria o processo mais complexo e não garantiria uma descrição mais perfeita do estudo por causa das inúmeras possibilidades de erros envolvidos no processo. Além disso, aumentaria a oscilação da função, dificultando a análise de pontos não descritos na amostra.

Numa outra abordagem poderíamos fazer a análise dos pontos por região ou intervalo, ou seja, poderíamos fazer um ajuste para a parte elástica, que tem comportamento linear e outro para a parte plástica. Para esta, é sugerido pela **ABNT NBR6892 – 1**, um ajuste polinomial. Esse método de fragmentação dos dados para ajuste é chamado de *spline*, que é definido como função segmentada por polinômios, isto é, conjunto de funções polinomiais, conectadas por “nós” ou ainda pode ser pensado como regressão por partes [25].

Deste modo, tomemos inicialmente os pontos compreendidos na região elástica, dados pela Tabela 3.4.

Admitindo o mesmo processo de minimização descrito nessa seção para ajuste a uma função linear do tipo  $\hat{y}_i = P_1(x_i) = a_1x_i + a_0$ , teremos a função

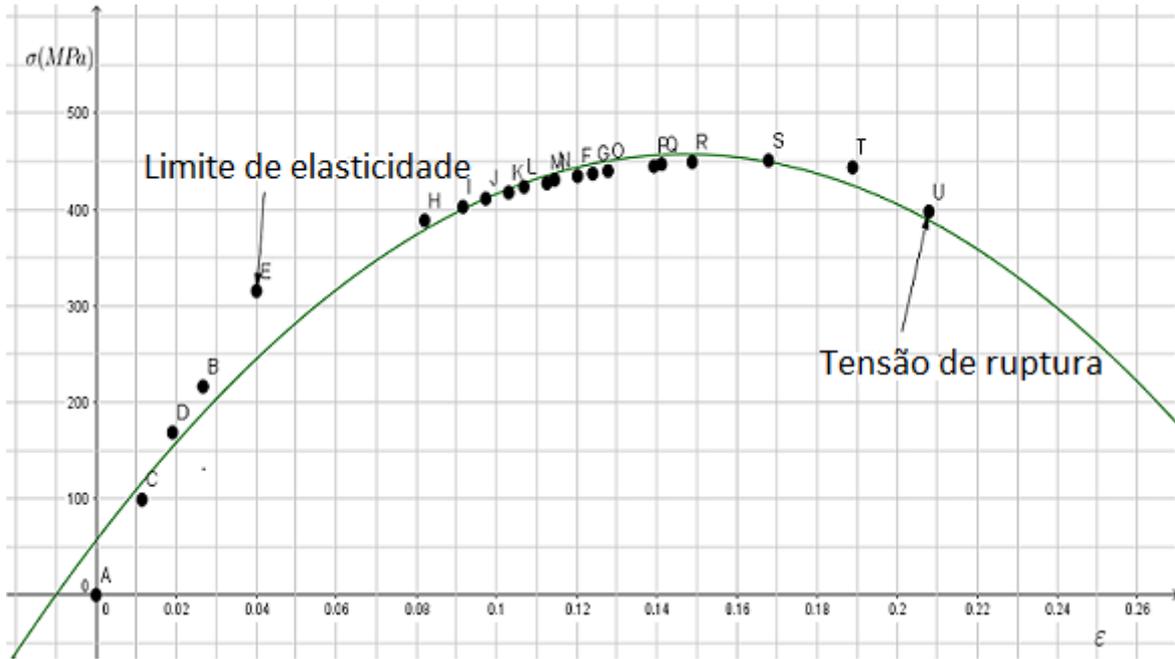


Figura 3.6: Gráfico de dispersão e Função ajustada

$i$	$y_i$	$x_i$
1	0,0000	0,0000
2	98,997581	0,011451
3	168,635721	0,019084
4	216,435341	0,026718
5	315,544342	0,040076

Tabela 3.4: Pontos da região elástica

$$\hat{y}_i = 7643,823741x_i + 11,129456.$$

Essa função nos fornece um coeficiente de determinação  $R^2 = 0,995349$ , indicando que mais de 99% dos dados são descritos pela função. Ou seja, a função descreve com muita qualidade o conjunto de dados da porção elástica. Isto pode ser visualizado na figura 3.3 que descreve a função e o gráfico de dispersão.

O ajuste da parte plástica pode ser feito de modo análogo, a partir dos pontos da Tabela 3.5.

Admitindo que a distribuição desses pontos tem o contorno de uma função quadrática, considere  $\hat{y}_i = P_2(x_i) = a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0$  e minimizando  $E(\alpha) = \sum_1^{16} (y_i - \hat{y}_i)^2$ , encontraremos

$$\hat{y}_i = -12968,642246x^2 + 3937,083011x + 150,533303$$

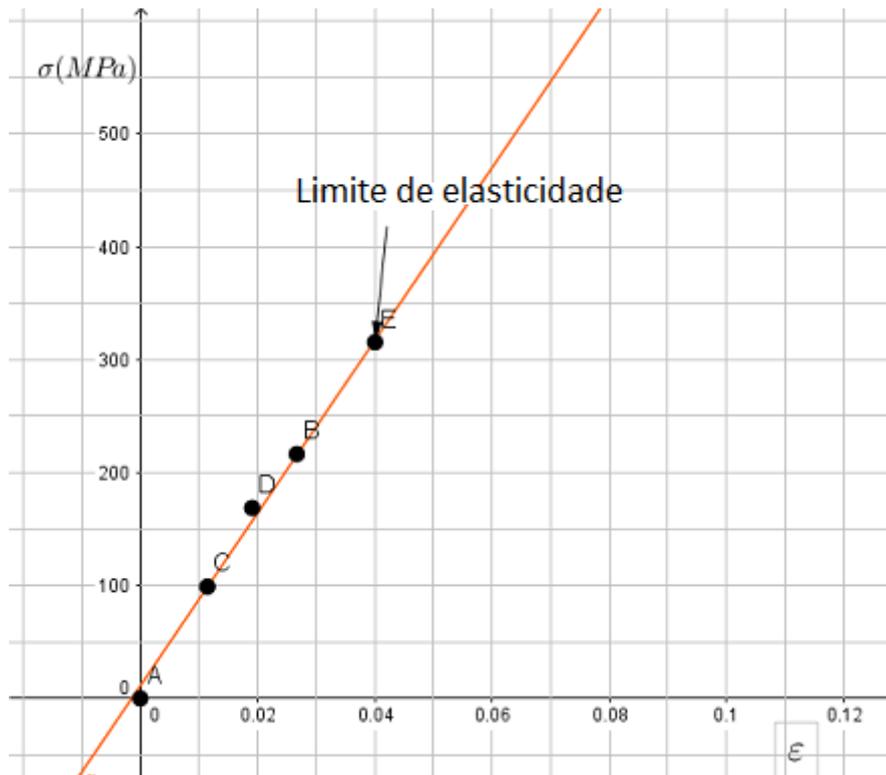


Figura 3.7: Gráfico de dispersão e Função ajustada à porção elástica

Para esta função, que descreve o comportamento do conjunto de pontos da região plástica, o coeficiente de determinação é

$$R^2 = 0,944210,$$

indicando representação de mais de 94% dos pontos da região, mostrando que o ajuste é de boa qualidade. Essa qualidade pode ser visualizada na Figura 3.8 que descreve o conjunto de pontos da região plástica e a função quadrática ajustada.

A análise feita separadamente das regiões elástica e plástica representa, com qualidade, modelos de funções que se ajustam adequadamente aos respectivos pontos que identificam cada região. Ambas as regiões representam um único fenômeno, daí torna-se relevante analisar o comportamento das duas funções em um mesmo sistema.

A definição de *split* nos indica um ponto de intersecção (nós) entre as funções, mas se percebe na Figura 3.9 que essa intersecção seria um ponto que iria distorcer a estimativa do limite de elasticidade (escoamento superior) e também negligenciar a representação do limite inferior de escoamento (ponto onde inicia a deformação plástica), usando o método da pré-deformação de 0,002. Este método consiste em traçar uma reta paralela à porção elástica a partir de uma deformação de 0,002 e a intersecção desta paralela com a curva, que descreve o fenômeno, indica o limite de escoamento inferior.

Segundo Callister [11] e a **ABNT NBR 6892 – 1** o limite de elasticidade ou escoamento

$i$	$y_i$	$x_i$
1	388,766526	0,082062
2	402,879855	0,091604
3	411,496415	0,097329
4	417,735992	0,103054
5	423,659877	0,106870
6	427,503902	0,112596
7	430,995094	0,114505
8	434,801979	0,120229
9	437,457513	0,124047
10	440,038767	0,127864
11	445,071283	0,139313
12	447,188283	0,141222
13	449,416703	0,148856
14	450,995168	0,167940
15	443,919933	0,188932
16	397,940190	0,208016

Tabela 3.5: Pontos da região plástica

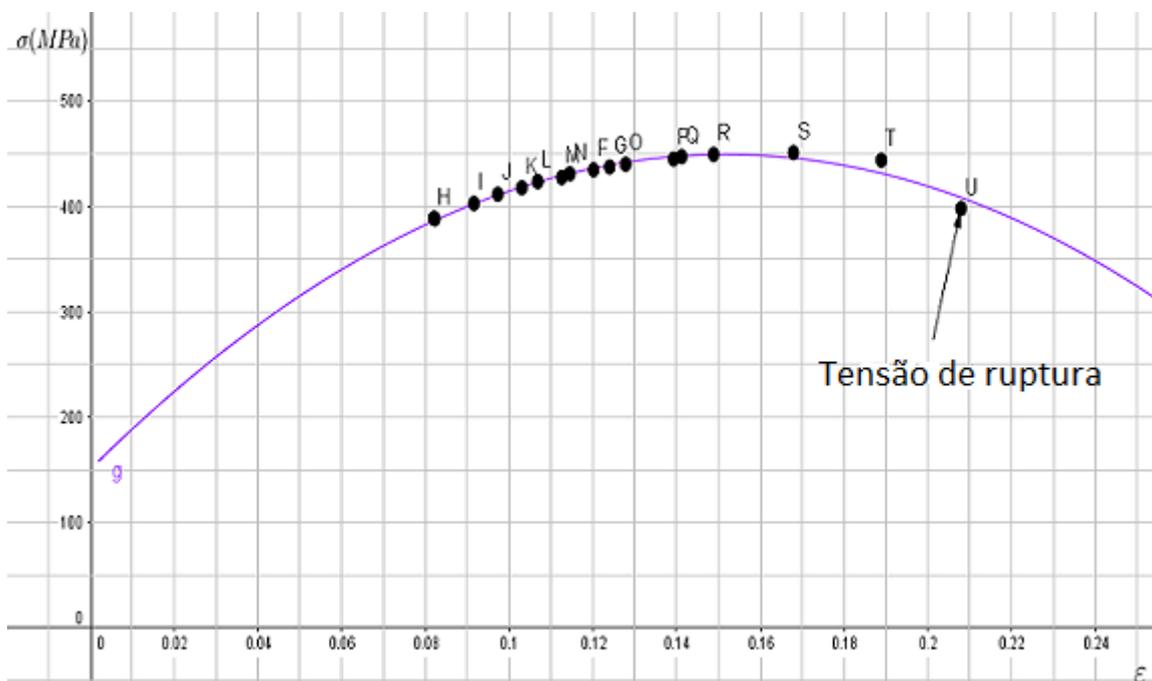


Figura 3.8: Gráfico de dispersão e Função ajustada à porção plástica

mento superior, determinado pela curva, é definido como o valor máximo de tensão antes do primeiro decréscimo e o limite de escoamento inferior é definido como o menor valor da

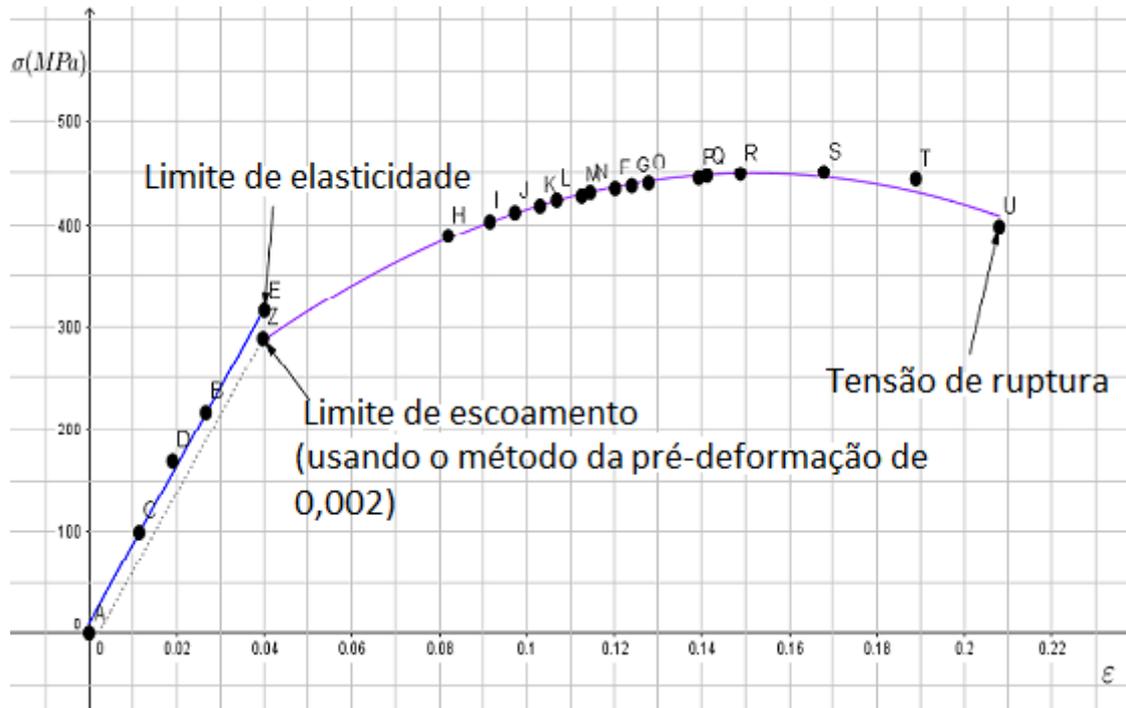


Figura 3.9: Gráfico de dispersão e as Funções ajustadas

tensão durante a deformação plástica, ou seja, ocorre uma queda na tensão no momento da transição elástico - plástico. Logo, podemos interpretar essa queda de tensão como um ponto ou região de descontinuidade em torno de  $\varepsilon = 0,04$  (deformação onde a reta paralela intercepta a curva que descreve a região plástica) e a partir dele inicia-se a deformação plástica, obedecendo o comportamento descrito pela função quadrática ajustada aos dados.

Portanto, o ajuste de curva do problema tensão×deformação nesta última interpretação nos permite estimar, com qualidade, o limite inferior e superior de escoamento a partir dos pontos  $Z$  e  $E$ , respectivamente, e ainda o limite de resistência à tração a partir do vértice da função quadrática.

Podemos, mesmo com bons resultados, explorar o problema admitindo outros polinômios, subdividindo em outros intervalos de deformação ou até ajustando os dados para funções não lineares. Com isso, gerar novos problemas e discussões em torno do método de mínimos quadrados e a relação tensão×deformação.

## Capítulo 4

# Proposta de discussão na educação básica do problema de ajuste da relação tensão $\times$ deformação

### 4.1 Atividade

A atividade descrita nessa seção tem a intenção de criar um ambiente didático em que os alunos aprimorem seus conhecimentos, desenvolvendo sua autonomia na pesquisa, habilidade em formular e resolver problemas, lidar com temas de interesse, aplicar conteúdos e desenvolver a criatividade, tudo isso orientado e supervisionado pelo professor.

Descrevemos uma atividade que deve ser adaptada ao contexto e ao tempo disponível, podendo novas questões serem levantadas pelos professores ou alunos. As propostas descritas estão ordenadas em grau de dificuldade, exigindo do aluno mais dedicação e concentração no desenvolvimento do problema, demandando do professor maiores cuidados na condução da atividade e dando mais autonomia para o aluno definir grau de função, número de casas decimais utilizadas e outras questões que surgem no desenvolvimento da atividade.

A quantidade de aulas disponibilizadas para o desenvolvimento da atividade, bem como o tempo dado a discussão do tema, fica a critério do professor, de acordo com o planejamento da sua disciplina. Cabe destacar que, independente do tempo cedido, deverão existir momentos didáticos que possibilitem o desenvolvimento e alcance dos objetivos de certas etapas programadas para resolução do problema.

Mesmo que esta seção esteja discutindo uma proposta de atividade para aplicação na educação básica, especificamente no ensino médio, acreditamos que ela possa ser adaptada a contextos no ensino superior, onde existem mais informações e o problema pode admitir uma abordagem mais criativa, sendo possível a melhoria do modelo de ajuste e descrição

do fenômeno ou ampliação da natureza do problema desde a fase da coleta de dados.

### Competências envolvidas

- Matrizes e determinantes;
- Sistemas lineares;
- Funções polinomiais;
- Construção de gráfico.

### Habilidades

- Resolver problemas com dados apresentados em tabelas;
- Ler, interpretar e utilizar representações matemáticas (tabelas, gráficos, expressões, etc);
- Transcrever mensagens matemáticas da linguagem corrente para linguagem simbólica (equações, gráficos, diagramas, fórmulas, tabelas etc.) e vice-versa, interpretando-as;
- Montar o sistema  $X\alpha = y$  a partir de dados tabelados;
- Resolver o sistema linear da equação de mínimos quadrados  $XX^t\alpha = X^ty$ ;
- Avaliar a qualidade da função ajustada.

### Motivação

Em vários momentos na vida estudantil, tanto na educação básica quanto superior, fazemos o estudo de inúmeras funções e suas propriedades, descrevendo seu comportamento e analisando suas tendências. Na educação básica, normalmente iniciamos o estudo de funções desde o 9º ano do ensino fundamental. No ensino superior, em alguns cursos, são discutidos problemas associados ao comportamento de funções, limites, derivadas, concavidades, extremos, entre outros, normalmente nas disciplinas de Cálculo. Muito comum nestes momentos é apresentar essas funções como descritoras de fenômenos físicos, crescimento de determinados números de indivíduos em relação ao tempo, entre outros.

Portanto, diante dessa situação, alguns questionamentos surgem naturalmente, tais como: Como essas funções são definidas? Qual método pode ser utilizado? Além de outras questões que surgem espontaneamente na problematização dessa situação. Assim, estudar, discutir, apresentar e trabalhar o método dos mínimos quadrados como possibilidade de responder a essas perguntas, tanto na educação básica quanto superior, é uma maneira possível de responder a tais questionamentos e explorar outras possibilidades que podem surgir com um estudo dessa natureza.

Outro argumento associado ao processo de determinação da função e que pode motivar o processo de investigação é o fenômeno em estudo. Neste caso, devemos observar que no cotidiano várias estruturas a nossa volta são feitas usando ou associando ligas metálicas e que essas, em sua maioria, estão sujeitas à tração, compressão ou cisalhamento. Assim, estudar suas propriedades mecânicas é de interesse de inúmeras áreas. Por exemplo, determinar qual a tensão que certo material pode sofrer sem que tenha uma deformação permanente ou qual a tensão máxima admitida por essa liga metálica.

Logo, a relevância da discussão do fenômeno tensão  $\times$  deformação e o seu comportamento em situações experimentais é significativa na educação básica, formação técnica e superior ou até mesmo em estudos independente de análise de produtos no mercado. Nesse contexto, analisaremos os pontos que descrevem o comportamento da deformação do aço carbono *SAE1020* quando sujeitos à determinada tensão.

## Propostas

1. Descrevendo o processo, determine qual função da forma  $\hat{y}_i = a_1x_i + a_0$  melhor se ajusta aos pontos fornecidos que relacionam tensão  $\times$  deformação na liga metálica (aço carbono SAE 1020) na porção elástica.

Admita uma aproximação de 4 casas decimais e considere  $x_i$  como deformação  $y_i$  como tensão.

$i$	$y_i$	$x_i$
1	0,0000	0,0000
2	98,9976	0,0115
3	168,6357	0,0191
4	216,4353	0,0267
5	315,5443	0,0401

Tabela 4.1: Pontos da região elástica

2. A partir da análise dos pontos dados que descrevem o comportamento da região plástica da relação tensão  $\times$  deformação na liga metálica (aço carbono SAE 1020), qual a função quadrática que melhor se ajusta a esses pontos? A partir da função ajustada, qual o ponto de máxima tensão que ela fornece?

Admita uma aproximação de 4 casas decimais e considere  $x_i$  como deformação  $y_i$  como tensão.

$i$	$y_i$	$x_i$
1	388,7665	0,0821
2	402,8799	0,0916
3	411,4964	0,0973
4	423,6599	0,1069
5	430,9951	0,1145
6	437,4575	0,1240
7	445,0713	0,1393
8	449,4167	0,1488
9	450,9952	0,1679
10	397,9402	0,2080

Tabela 4.2: Pontos da região plástica

3. Analise os pontos dados junto ao gráfico de dispersão e a partir da discussão entre seus pares, determine a função polinomial que melhor se ajusta aos pontos descritos no fenômeno tensão  $\times$  deformação na liga metálica (aço carbono SAE 1020). Discuta também a qualidade da função ajustada.

Considere  $x_i$  como deformação  $y_i$  como tensão.

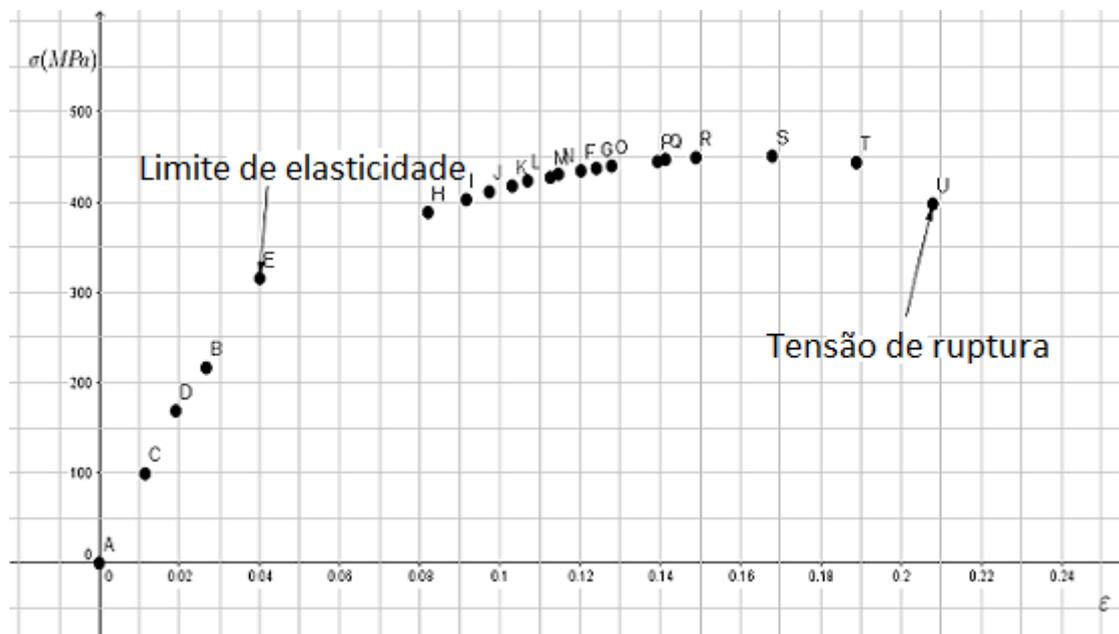


Figura 4.1: Gráfico de dispersão

$i$	$y_i$	$x_i$
1	0,0000	0,0000
2	98,9976	0,0114
3	168,6357	0,0191
4	216,4353	0,0267
5	315,5443	0,0401
6	388,7665	0,0821
7	402,8799	0,0916
8	411,4964	0,0973
9	417,7360	0,1031
10	423,6599	0,1069
11	427,5039	0,1126
12	430,9951	0,1145
13	434,8020	0,1202
14	437,4575	0,1240
15	440,0388	0,1279
16	445,0713	0,1393
17	447,1883	0,1412
18	449,4167	0,1489
19	450,9952	0,1679
20	443,9199	0,1889
21	397,9402	0,2080

Tabela 4.3: Dados do fenômeno de tensão  $\times$  deformação

### Momentos do desenvolvimento da atividade

- Primeiro momento: Apresente a proposta, descrevendo o processo de ajuste de curva e a possibilidade de interpolação e extrapolação dos dados, abordando também a relação tensão e deformação em ligas metálicas. Esse momento é extremamente importante, pois é nele que o aluno é convidado a desenvolver a proposta e sua curiosidade é despertada, animando-o em prol do desenvolvimento da atividade e onde determinadas definições são expostas e debatidas;
- Segundo momento: Nessa etapa pode ser feita a discussão coletiva dos dados e o que eles relacionam, delimitando o problema, a partir do nível de conhecimento da turma, sendo sugerida a formação de grupos de trabalho para a definição da função a ser ajustada;
- Terceiro momento: Neste momento os alunos podem fazer individualmente ou em

grupo a construção da matriz  $X\alpha = y$  e a resolução do sistema linear dado pela equação  $XX^t\alpha = X^ty$ , definindo os coeficientes da função ajustada. Deve-se estimular o uso de calculadoras e outros recursos que podem ser adequados para o momento e definir, em grupo, possíveis aproximações e o número de casas decimais admitidas nos cálculos.

- Quarto momento: Agora, nesse momento, deve-se pedir que os alunos socializem seus resultados. Nesta etapa, fica a critério do professor, fazer a avaliação da qualidade da função, a partir do coeficiente de determinação ou a partir da distribuição dos desvios  $y_i - \hat{y}_i$  em torno de zero. Dependendo dos recursos disponíveis, pode ser usado algum software para construção de gráficos ou simplesmente uma cartolina.

### **Avaliação e resultados esperados**

É importante destacar que o aluno deve ser avaliado em todo o processo de resolução do problema, não só quanto a validação do resultado final esperado. Acreditamos que critérios admitidos durante o processo de resolução façam os alunos encontrarem resultados com um determinado grau de variação, mas que podem ser válidos a partir dos critérios escolhidos durante o processo. Assim, a avaliação do processo e os resultados encontrados podem considerar os seguintes aspectos:

- Participação e colaboração dentro dos grupos de trabalho;
- Iniciativa e espírito de liderança;
- Conclusão dos objetivos traçados em cada etapa;
- Qualidade da produção escrita e operacionalização numérica dos resultados;
- Capacidade de análise e síntese dos resultados encontrados;
- Extensão e aplicação do conhecimento adquirido;
- Qualidade na socialização oral e escrita dos resultados encontrados.

Mesmo com toda possibilidade de adaptação das atividades às mais variadas realidades, espera-se que as funções ajustadas estejam próximas às encontradas no quarto capítulo deste trabalho, em especial no que se refere à proposta de atividade I e II. Quanto a proposta III, ela pode tomar contornos mais variados, pois na mesma, os alunos têm mais liberdade de escolher e ajustar o problema a funções com o grau que considerarem mais adequado e/ou admitir outros critérios de aproximação numérica, tanto quanto fazer vários ajustes ou até excluir pontos.

## Capítulo 5

# Conclusão

A representação de um evento real, está associada a inúmeros estudos experimentais que o reproduzem e, nesse contexto, o ajuste de curva é trabalhado na intenção de descrever o comportamento da relação estudada, a fim de poder determinar valores não descritos. Em especial, o ajuste polinomial, por aproximar os dados a uma função que genericamente tem um grande poder analítico, possui rico potencial prático para interpolação e extrapolação de resultados.

O ajuste de curva pelo método dos mínimos quadrados admite uma metodologia que traz bons resultados em relação à aproximação dos dados, podendo ser amplamente utilizada em estudos de natureza científica e experimental. Também, pode ser utilizada como elemento gerador de aprendizagem e iniciativa à pesquisa na educação básica e ensino superior, justificando de certo modo, o processo de construção de funções que são tomadas como descritoras de fenômenos da física, biologia, engenharia, estatística e outras áreas.

A análise do problema de tensão×deformação gerou resultados bem interessantes quanto ao comportamento dos dados e funções encontradas. Ajustar uma função para a parte elástica e outra para a parte plástica determinou bons resultados e pontos bem distribuídos em torno da curva. Além do método dos mínimos quadrados ser adequado para esse tipo de estudo, ele pode ser discutido na educação básica, especificamente no ensino médio, e o problema de tensão×deformação ser um dos pontos de partida dessa discussão.

Estudar o método dos mínimos quadrados foi enriquecedor, à medida que algumas questões eram discutidas, outras situações e problemas emergiam e as possibilidades de exploração do tema se tornavam mais amplas. Acreditamos que tudo que foi apresentado pode ser explorado e debatido em contextos científicos e de aprendizagem matemática.

### Estudos futuros

- Desenvolver atividade didática, no ensino médio ou superior, envolvendo o processo de ajuste de curva do problema tensão×deformação;

- Estudar o processo de ajuste de curva para funções não polinomiais;
- Aprofundar os estudos sobre o método de mínimos quadrados, estudando as inversas generalizadas;
- Criar uma rotina computacional simples e didática para ajuste de curva.

# Referências Bibliográficas

- [1] ABNT NBR ISO 6892 – 1. *Materiais metálicos - Ensaio de Tração: Método de ensaio à temperatura ambiente*, 70 pp., (2013).
- [2] ARAUJO JR, Pedro E. *Estudo da correlação das propriedades mecânicas do aço inoxidável AISI304 e do aço carbono SAE1020 utilizando medição por processamento digital de imagens*. Universidade de Salvador - campus Feira de Santana, 14 pp. (2016). (Projeto de pesquisa). Escola de Arquitetura, Engenharia e Tecnologias da Informação, Feira de Santana.
- [3] ARAUJO JR, Pedro E. *Influências de solicitações térmicas na resistência à fadiga do aço 304L*, 108 pp., (2005). Dissertação (Mestrado em Ciências em Engenharia Mecânica). Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Belo horizonte, Minas Gerais. Disponível em: < <http://livros01.livrosgratis.com.br/cp001866.pdf> >. Acesso em: 22 jan. de 2017.
- [4] ANTON, Howard. *Álgebra linear contemporânea*. Ed. Bookman, Porto Alegre, 610 pp., (2006).
- [6] BARROSO, Leônidas C., et al. *Cálculo numérico com aplicações*. 2 Ed. HARBRA, São Paulo, 367 pp., (1987).
- [7] BASSANEZI, Carlos R. *Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: uma nova estratégia*. Ed. Contexto, São Paulo, 387 pp., (2002).
- [8] BIEMBENGUT, Maria S; HEIN, Nelson. *Modelagem matemática no ensino* 3. Ed. Contexto, São Paulo, 186 pp., (2003).
- [9] BOLDRINI, José Luiz, et al. *Álgebra linear*. 3 Ed. HARBRA, São Paulo, 411 pp., (1980).
- [10] BURDEN, Richard L. *Análise numérica*. Ed. Thomson, São Paulo, 736 pp., (2003).
- [11] CALLISTER, Jr. *Ciência e Engenharia dos Materiais: Introdução*. Ed. LTC, Rio de Janeiro, 705 pp., (2008).

- [12] FERREIRA, Daniel F. *Estatística Básica*. Ed. Editora UFLA, Lavras, 664 pp.,(2005).
- [13] FRENSEL, Katia R.; DELGADO, Jorge J. *Introdução à álgebra linear: um curso de nivelamento*. Niterói, Departamento de Matemática Aplicada e Geometria, UFF 362 pp.,(2005). Disponível em : <<http://www.ebah.com.br/search?q=frensel>>. Acesso em: 15 jul. 2017.
- [14] GUIMARÃES, Paulo S. *Ajuste de curvas experimentais*. Ed. Editora UFSM, Santa Maria, 233 pp.,(2001).
- [15] HELENE, Otaviano. *Método dos mínimos quadrados com formalismo matricial*. Ed. Editora Livraria da Física, São Paulo, 102 pp.,(2006).
- [16] HIBBELER, Richard C. *Resistência dos Materiais*. 5 Ed. Editora Pearson Prentice Hall, São Paulo, 670 pp., (2004).
- [17] LAY, David C. *Álgebra linear e suas aplicações*. 2 Ed.LTC, Rio de Janeiro, 504 pp., (1999).
- [18] LIMA, Paulo C. *Delineamento e Análise de experimentos*. Ed. UFLA/FAEPE, Lavras, 71 pp. (2007).
- [20] MORAIS, Augusto R. *Introdução à álgebra de matrizes*. Ed. UFLA/FAEPE, Lavras, 240 pp.,(2001).
- [22] POOLE, David. *Álgebra Linear*. Ed. Cengage Learning, São Paulo, 690 pp.,(2009).
- [23] SILVA, José Roberto G. *Experiências de ciências dos materiais*. Ed. Edgard Blucher da Universidade de São Paulo, São Paulo, 236 pp.,(1973).
- [25] UTPOTT, Nicole M. *Regressão Logística utilizando b-splines: Uma maneira de lidar com as relações não lineares*, 75 pp.,(2015). Monografia (Bacharel em Estatística),Instituto de Matemática e Estatística, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/129437/000976776.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 22 marc. de 2017.
- [26] VEIGA, Ruben Delly. *Análise de Regressão e séries temporais*. Ed.UFLA/FAEPE, Lavras, 103 pp.,(2000).
- [27] YIN, Robert K. *Estudo de caso - Planejamento e Métodos*. Ed.Bookman, São Paulo, 321 pp., (2005).
- [28] WENDELL,Fleming H. *Functions of Several Variables*. Ed.Spring, Second edition, NY.(1987).