DCC–IME–USP

Carlos Eduardo Ferreira
Sala 297A Tel.: 818 6140
e-mail cef@ime.usp.br

José Coelho de Pina
Sala 164B Tel.: 818 6295
e-mail coelho@ime.usp.br

MAC-115 – Introdução à Computação

Instituto de Química - Primeiro Semestre de 2000

Exercício-Programa 1 Entrega: **27 de abril de 2000**

A mesma química do Exercício-Programa 1 (ela novamente ...), professora do IQ-USP, deseja obter a curva de calibração do composto secreto blá-blá-blá. Ela preparou várias amostras com concentrações diferentes de blá-blá-blá e leu as absorbâncias de cada amostra em um espectrofotômetro, no comprimento de onda de máxima absorbância deste composto. As concetrações e as respectivas absorbâncias foram colocadas em uma tabela e digitadas por um estagiário (quem mais ...) em um arquivo. Sabendo que no intervalo estudado a relação entre as concentrações das amostras e as absorbâncias é linear, a tal professora deseja um programa que determine a equação da reta $y = mx + b$ que melhor aproxima os dados colhidos, onde o eixo y das ordenadas representa a absorbância e o eixo x das abscissas representa a concetração das amostras.

Preocupada em ter certeza de obter um programa confiável e muito bem feito, a professora resolveu ordenar que os alunos de MAC-115 façam um programa que recebe uma seqüência de pares de pontos e determina a reta que mais se aproxima desses pontos, utilizando o método dos mínimos quadrados, que está descrito logo a seguir.

Método dos mínimos quadrados

Nosso objetivo é aproximar uma função f, para a qual só conhecemos os valores em alguns pontos, por uma reta utilizando o método dos mínimos quadrados. Este caso particular da aplicação do método é conhecido pelo nome de *regressão linear*.

A função f será dada através de uma tabela de pontos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ do seu gráfico (ou seja, $y_i = f(x_i)$ $(i = 1, \ldots, n)$).

Aproximar uma função f tabelada nos pontos $x_1, \ldots, x_n$ pelo método dos mínimos quadrados significa determinar os parâmetros m e b da reta $y = mx + b$ de modo que a soma das distâncias dos pontos dados até a reta obtida seja mínima. A Figura 1 mostra a reta $y = 1.1x - 0.2$ que aproxima a função f dada através dos pontos $(0,0), (1,1), (2,1), (3,4), (4,4)$.

O chamado coeficiente angular m e coeficiente linear b da reta $y = mx + b$ que melhor aproxima os pontos $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ podem ser obtidos resolvendo-se o seguinte sistema de equações lineares:

$$
\begin{array}{lcccl}
b \times n & + & m \times (\sum_{i=1}^{n} x_i) & = & \sum_{i=1}^{n} y_i \\
b \times (\sum_{i=1}^{n} x_i) & + & m \times (\sum_{i=1}^{n} x_i^2) & = & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i
\end{array}
$$

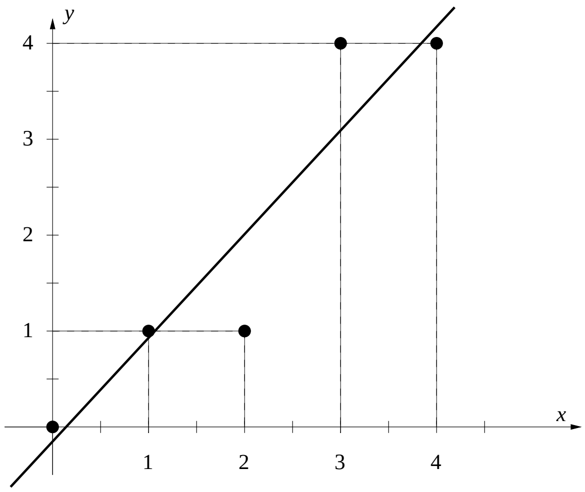

Figura 1: Aproximação de um conjunto de pontos por uma reta.

Pela regra de Cramer sabemos que a solução do sistema acima é dada por:

$$\begin{aligned} b &= \frac{(\sum_{i=1}^n y_i) \times (\sum_{i=1}^n x_i^2) - (\sum_{i=1}^n x_i) \times (\sum_{i=1}^n x_i y_i)}{n \times (\sum_{i=1}^n x_i^2) - (\sum_{i=1}^n x_i) \times (\sum_{i=1}^n x_i)} \\ m &= \frac{n \times (\sum_{i=1}^n x_i y_i) - (\sum_{i=1}^n x_i) \times (\sum_{i=1}^n y_i)}{n \times (\sum_{i=1}^n x_i^2) - (\sum_{i=1}^n x_i) \times (\sum_{i=1}^n x_i)} \end{aligned}$$

Para o exemplo da Figura 1 temos que

x (concentração)	0	1	2	3	4
y (absorbância)	0	1	1	4	4

e portanto

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n x_i &= 0+1+2+3+4 = 10 \\ \sum_{i=1}^n y_i &= 0+1+1+4+4 = 10 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 &= 0+1+4+9+16 = 30 \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i &= 0+1+2+12+16 = 31 \end{aligned}$$

Finalmente, usando as fórmulas acima obtemos

$$\begin{aligned} b &= \frac{10 \times 30 - 10 \times 31}{5 \times 30 - 10 \times 10} = -\frac{1}{5} = -0.2 \\ m &= \frac{5 \times 31 - 10 \times 10}{5 \times 30 - 10 \times 10} = \frac{11}{10} = 1.1 \end{aligned}$$

O quê o seu programa deve fazer

O seu programa deverá ler um seqüência de pontos de um arquivo, como descrito abaixo, e calcular os coeficientes m e b da reta $y = mx + b$ que melhor aproxima os pontos dados.

Exemplo de entrada para o seu programa (conteúdo do arquivo de dados):

```
0  0
1  1
2  1
3  4
4  4
```

Exemplo de saída fornecida pelo programa para os dados acima:

```
Aproximacao de uma reta pelo métodos dos mínimos quadrados

Entre com o nome do arquivo de dados: dados.txt
x1 =   0.000 y1 =   0.000
x2 =   1.000 y2 =   1.000
x3 =   2.000 y3 =   1.000
x4 =   3.000 y4 =   4.000
x5 =   4.000 y5 =   4.000


[      5   10.000] b = [ 10.000]
[ 10.000   30.000] m = [ 31.000]

denominador =  50.000.

A equacao da reta e' y = (  1.100) x + ( -0.200).
```

Esqueleto do seu programa

Para ler os dados de um arquivo use o seguinte ‘esqueleto’ de programa

```
#include <stdio.h>

#define TAM_NOME 100

int main(void) {
  FILE *arqentrada;
  char nome[TAM_NOME];
  double x, y, m, b;

  /* outras declaracoes que voce julgar necessarias */
  [ ... ]

  printf("\n\nAproximacao de uma reta pelo metodos dos minimos quadrados\n\n");
  printf("Entre com o nome do arquivo de dados: ");
  scanf("%s", nome);

  if ((arqentrada = fopen(nome,"r")) == NULL) {
    printf("Arquivo %s nao foi encontrado\n\n", nome);
    return 1;
  }

  while (!feof(arqentrada)) {
    /* leitura do proximo ponto */
    fscanf(arqentrada,"%lf %lf ", &x, &y); /* importante: deixar espaco
                                              em branco apos %lf */
    printf("x = %7.3f y = %7.3f\n", x, y);

    /* trecho do seu programa */
    [ ... ]
  }

  /* trecho do seu programa */
  [ ... ]

  printf("A equacao da reta e' y = (%7.3f) x + (%7.3f).\n\n\n", m, b);

  fclose(arqentrada);
  return 0;
}
```