$4^{\underline{o}}$ Exercício de Algoritmos Numéricos I - 19/2
Ajuste de Curvas usando o Octave - DI/UFES

Objetivo:

O objetivo desse exercício é usar regressão polinomial e ajuste não-linear, pelo **método dos quadrados mínimos**, para ajustar polinômios no Octave e resolver aplicações.

Conceitos/comandos importantes:

- `p = polyfit(x,y,m)` (ajustar um polinômio de grau m a tabela de dados (x, y) contendo n pontos, tais que $n > m + 1$, no sentido dos mínimos quadrados)
  `p` é um vetor contendo os coeficientes de $p_m(x) = a_m x^m + \cdots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$, ou seja, $p = [a_m \ \ldots \ a_2 \ a_1 \ a_0]$
- `polyout(p, "x")` – mostra o polinômio no formato $p = a_p x^p + a_{p-1} x^{p-1} + \ldots a_1 x + a_0$.
- `x = linspace` (x_a,x_b,tam), gera um vetor x com $x_1 = x_a$, $x_{tam} = x_b$ e tam componentes igualmente espaçadas.
- `y = polyval(p,x)` – calcula o valor do polinômio `p` em todas as componentes de `x`, gerando o vetor `y`.
- `mean(Y)` – calcula a média das componentes do vetor Y.
- $norm(Y, 2)$ calcula a norma euclidiana do vetor Y ($norm(Y, 2) = \sqrt{(y_1^2 + y_2^2 + \ldots + y_n^2)}$.

Considerando as funções descritas acima resolva os seguintes exercícios:

1. Os dados a seguir representam o tempo (T), em segundos, de congelamento para um certo volume (V) de uma substância. Use a regressão para determinar um modelo para prever T como uma função de V. Tente várias possibilidades - linear, parabólica, etc. Estime o tempo de congelamento usando 2.8 volumes. Mostre o estudo feito para a regressão polinomial, imprimindo a tabela contendo r^2 e σ. Mostre, em um mesmo gráfico, os pontos da tabela e a curva do melhor ajuste.

V	2.65	2.65	2.7	2.7	2.75	2.75	2.85	2.85	2.90	2.90	2.95	2.95	3.00	3.00
T	6.85	6.80	6.70	6.30	6.33	6.20	5.90	5.82	5.80	5.80	6.15	6.00	6.30	6.15

2. Vamos utilizar dois modelos de Michaelis-Menten [1] para analisar o crescimento de uma bactéria v como uma função da concentração de oxigênio $[S]$, descritos pelas equações:

$$Caso\,1: \quad v = \frac{v_m [S]}{k_s + [S]} \tag{1}$$

$$Caso\,2: \quad v = \frac{v_m [S]^2}{k_s^2 + [S]^2} \tag{2}$$

onde v_m é o crescimento máximo da bactéria e k_s é a constante representando a metade do crescimento máximo, como mostrado no Fig. 1. As equações descrevem uma relação que se estabiliza com o aumento de $[S]$, onde a equação (2) representa um modelo de segunda ordem.

Use o método dos quadrados mínimos para ajustar os dados da tabela abaixo com versões linearizadas das Equações (1) e (2). Além de estimar os parâmetros dos modelos, avalie a qualidade dos ajustes através de medidas estatísticas e gráficos dos ajustes.

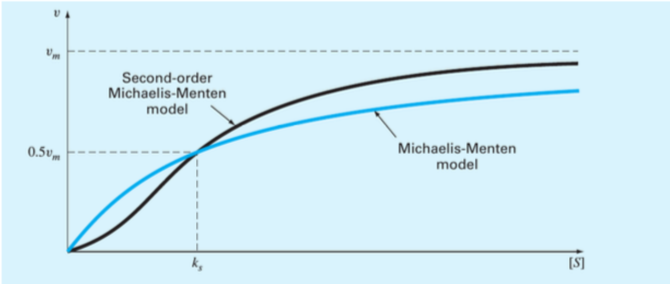

Figura 1: Duas versões do modelo de Michaelis-Menten para cinética enzimática.

$[S]$	1.3	1.8	3	4.5	6	8	9
v	0.07	0.13	0.22	0.275	0.335	0.35	0.36

Para isso, execute os itens a seguir:

(a) Determine os coeficientes dos ajustes e recupere as equações dos modelos originais. Estime a taxa de crescimento em $[S] = 7$.

(b) Calcule r^2 para os modelos linearizados.

(c) Faça os gráficos das soluções linearizadas ($Caso\,1:\ 1/[S] \times 1/v$ e $Caso\,2:\ 1/[S]^2 \times 1/v$) e originais ($[S] \times v$). Mostre em um mesmo gráfico a curva do ajuste junto com os pontos tabelados.

(d) Analise qual caso fornceceu um ajuste mais adequado, baseado nos valores estimados para $[S] = 7$, medidas estatísticas e gráficos dos ajustes.

Relatório:

Entregue os arquivos `.m` desenvolvidos e um relatório suscinto com suas conclusões sobre os objetivos listados acima em pdf (nome do arquivo AN192-EXE4-<nome>) e via email (luciac@inf.ufes.br) até 15/10/2019. O título do email deve ser AN192-EXE4-<nome>.

Bibliografia

[1] Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB for Engineers and Scientists, 2012.