

Jorge Manuel Filipe dos Santos

Algoritmos para o Ajustamento de Quádricas

Departamento de Matemática
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade de Coimbra
1995

Algoritmos para o Ajustamento de Quádricas

*Trabalho de síntese com vista à
realização das Provas de Aptidão
Pedagógica e Capacidade Científica*

Agradecimentos

A realização deste trabalho só foi possível graças à colaboração, directa ou indirecta, de muitas pessoas. Correndo o risco de omitir algum nome, não poderia deixar de salientar os que de mais de perto me ajudaram :

A Prof. Dra. Dina Santos-Loff, por me ter dado a oportunidade de trabalhar ao seu lado num problema já por si iniciado e pela disponibilidade, ajuda e encorajamento com que sempre me apoiou;

O Prof. Dr. Artur Soares Alves, pela orientação, supervisão, e ainda, pelo esforço e tempo despendido no sentido de me criar, dentro do possível, as melhores condições de trabalho.

Quero ainda agradecer ao Departamento de Matemática na pessoa do seu Presidente e ao Centro de Informática da Universidade de Coimbra, pelo meios postos ao meu alcance.

Para terminar, queria manifestar o meu apreço por todo o apoio prestado pelos meus colegas e amigos que ao longo de todo este tempo se esforçaram para que tudo me corresse pelo melhor.

Índice

Introdução geral

Capítulo 1

Preliminares

1.1 Introdução	8
1.2 Sistemas de aquisição de coordenadas	10
1.2.1 Máquinas de medição de coordenadas (CMM)	11
1.2.2 Sistemas móveis	12
1.3 O problema do ajustamento a uma dada colecção de pontos de certos tipos de elementos geométricos previamente escolhidos	16
1.3.1 Processos directos de ajustamento : casos da recta e do plano	18
1.3.2 Processos iterativos de ajustamento : casos da esfera e do cilindro e cone de revolução	25

Capítulo 2

Ajustamento de quádricas pelo Método dos Mínimos Quadrados

2.1 Introdução	44
2.2 Formulação do problema	44

2.3 As quádricas e sua parametrização	45
2.3.1 Redução às direcções principais	47
2.3.2 Redução ao centro	48
2.4 Desvio de um ponto a uma quádrica em função dos parâmetros que a definem	53
2.5 Construção de algoritmos numéricos para a determinação de mínimos locais da função erro $E = \sum_{i=1}^S d_i^2$	58
2.5.1 Introdução	58
2.5.2 Determinação da aproximação inicial	59
2.5.3 Algoritmo numérico para minimizar a função erro usando apenas os valores da função	61
2.5.4 Algoritmo numérico para minimizar a função erro baseado no método de Gauss-Newton	73
2.5.5 Algoritmo numérico para minimizar a função erro não tendo em conta a sua forma particular de soma de quadrados	79

Capítulo 3

Propagação dos erros

3.1 Formulação do problema	82
3.2 Determinação das matrizes A e B das derivadas parciais	87
3.3 Determinação da matriz de covariância dos parâmetros ajustados e dos respectivos semi-eixos do elipsóide de confiança	91

Capítulo 4

Os desvios de forma

(Uma aplicação do ajustamento de quádricas)

4.1 Preliminares	96
4.2 Definição de desvios de forma baseados no ajustamento de quádricas	97

Conclusões Finais

Bibliografia

Introdução geral

A Metrologia Geométrica, tal como o nome sugere, tem como fim primordial a avaliação de características geométricas de objectos.

Como se trata de uma técnica com aplicação no controlo de qualidade, o interesse pela Metrologia Geométrica tem vindo a aumentar, devido à crescente importância que vem sendo dada à qualidade dos produtos. Este processo de controlo de qualidade geométrica é já usado em larga escala na indústria automóvel, na construção naval e aeronáutica, na metalomecânica e na indústria de moldes e de plásticos.

Este processo de avaliação baseia-se na medição de coordenadas cartesianas de pontos sobre a superfície do objecto a estudar e no posterior tratamento dessas coordenadas, no sentido de extrair toda a informação necessária à determinação das características geométricas desse objecto.

Na Metrologia Geométrica, considera-se que um objecto pode ser descrito pela união de um número finito de elementos geométricos (superfícies ou curvas) definidos, cada um deles, num dado referencial por um conjunto finito de parâmetros. São os valores destes parâmetros definidores, obtidos pelo processamento das coordenadas medidas, que vão permitir efectuar o controlo de qualidade por comparação entre os resultados obtidos para cada peça e os valores teóricos ideais.

Por conseguinte, vai ser necessário obter os valores para os parâmetros u_1, u_2, \dots, u_n , definidores de cada elemento geométrico, a partir de um conjunto de pontos representativo desse elemento geométrico,

$$\{(x_i, y_i, z_i) : i = 1, 2, \dots, s\},$$

cujas coordenadas foram medidas num certo referencial.

Geralmente os parâmetros são obtidos por ajustamento, usando o critério dos mínimos quadrados.

Até agora os elementos geométricos mais usados têm sido pontos, rectas, curvas spline, planos, circunferências, esferas, cilindros de revolução, cones de revolução, toros, etc.

O objectivo deste trabalho aparece assim como um contribuição para estender o universo dos elementos geométricos referidos à família mais geral das quádricas, a que pertencem já, à excepção das curvas spline e do toro, todos aqueles elementos. Nesse sentido, vamos estudar o ajustamento de quádricas, pelo critério dos mínimos quadrados, a um conjunto de pontos, dados pelas suas coordenadas cartesianas, implementando as rotinas numéricas que nos pareceram mais adequadas à obtenção desse ajustamento.

Para fazer o enquadramento do problema no contexto em que este surge, começamos por descrever sucintamente, no *capítulo 1*, o que é a Metrologia Geométrica. Depois de se referirem alguns processos de aquisição de coordenadas, expõe-se a construção de algoritmos de ajustamento já conhecidos para os elementos geométricos mais usados em Metrologia.

Tentando seguir os passos seguidos nos algoritmos já existentes, vamos construir, no *capítulo 2*, algoritmos de ajustamento pelo critério dos mínimos quadrados para as quádricas.

Como na prática as coordenadas medidas estão sempre afectadas de erros, houve a preocupação de fazer, no *capítulo 3*, um estudo sobre a propagação dos erros nas coordenadas aos parâmetros definidores das quádricas, obtidos pelos algoritmos de ajustamento descritos no capítulo anterior.

Finalmente, no *capítulo 4*, sugere-se a definição de novos desvios de forma com base no ajustamento de quádricas.

Capítulo 1

Preliminares

1.1 Introdução :

Todos os dias somos confrontados com processos de medição, muitas vezes isso acontece mesmo numa forma inconsciente quando, por exemplo, olhamos o velocímetro do carro ou o relógio ou pesamos fruta no supermercado. Para além destas actividades tão familiares, o termo “*medição*” envolve muitos aspectos menos familiares para a maioria das pessoas. É de tudo isso que trata a *metrologia* .

Etimologicamente, a palavra “*metrologia*” tem origem na junção dos termos gregos “*metro*” e “*logos*” cujo significado se poderá traduzir por “ciência da medição”.

É do conhecimento geral que qualquer medição consiste na comparação de um padrão com a grandeza a avaliar, o que faz surgir dois problemas :

- o primeiro tem a ver com o padrão a utilizar : a sua definição, o modo como será materializado e reproduzido, a precisão com que será reproduzida cada cópia e a facilidade da sua utilização, a sua universalidade serão aspectos a ter em conta;
- o segundo problema surge com o método de comparação a utilizar, intimamente relacionado com as características do padrão a usar e da própria grandeza a medir.

Actualmente, a diversidade de grandezas a medir é enorme, o que levou à consideração de vários domínios diferentes em *metrologia* .

A *metrologia por coordenadas* inclui-se no campo mais amplo conhecido por *metrologia geométrica* que, como o nome indica, tem como objectivo directo a análise das características geométricas de objectos. Devido à importância crescente que vem sendo dada à qualidade, a *metrologia geométrica* é cada vez mais solicitada *no controlo de qualidade*. A indústria automóvel, a construção naval e aeronáutica, a metalomecânica e a indústria de moldes e plásticos são alguns dos sectores onde ela é usada em larga escala.

Nas técnicas tradicionais da metrologia geométrica, que ainda são usadas actualmente, utilizam-se os instrumentos clássicos de medição directa: régua, micrómetro, etc. Para cada tipo de medição é necessário, quase sempre, um instrumento diferente. Por isso, o técnico deve escolher para cada operação o instrumento mais adequado. Este processo exige assim uma grande experiência por parte do operador e é pouco ou nada automatizado, levando a um baixo nível de eficiência.

Porém, a indústria está actualmente num estado de evolução que exige um processamento rápido e, geralmente, em larga escala. Por isso, quando é chamada a entrar no processo de fabricação, a metrologia deve satisfazer também essas exigências, sendo tão rápida e flexível quanto possível.

Na *metrologia por coordenadas* o método de medição utilizado é indirecto : baseia-se na identificação, através das suas coordenadas em relação a um referencial ortogonal directo, de um certo número de pontos (necessários à determinação completa da forma e dimensões do objecto em estudo) contendo toda a informação sobre a geometria do objecto em causa.

A *metrologia por coordenadas* também é já utilizada em laboratórios de investigação e de certificação, para além dos domínios de aplicação no *controlo de qualidade* já referidos.

Ao ser projectada uma dada peça, os seus requisitos funcionais determinam a forma e o tamanho de cada uma das partes que a compõem. No entanto, os desvios inevitáveis em relação a este protótipo ideal, inerentes ao processo de fabrico, levam o projectista a especificar dentro de que limites os produtos fabricados se podem afastar daquele. Isto é feito através da indicação de várias tolerâncias associadas ao projecto da peça em questão. No controlo de qualidade da peça fabricada, compara-se esta com os valores especificados para as várias tolerâncias. Por exemplo, no caso da verificação do diâmetro de um furo cilíndrico medem-se as coordenadas de pelo menos 5 pontos sobre a superfície interior do furo que irão permitir calcular os parâmetros do respectivo cilindro entre os quais se encontra o diâmetro. O valor do diâmetro assim obtido é então comparado com o valor nominal que vem no desenho da peça. Os desvios detectados são então confrontados com as tolerâncias definidas no projecto, no sentido de avaliar a qualidade geométrica do

objecto sob teste. Isto pode ser feito não só sobre o produto final mas também durante as várias fases intermédias de produção, permitindo a utilização dos resultados obtidos de pelo menos duas maneiras diferentes

- as peças fora de tolerância são rejeitadas (eventualmente corrigidas);
- o processo de fabrico pode ser reajustado, por forma a minimizar o número de peças defeituosas.

Assim, na resolução de problemas de que trata a Metrologia por Coordenadas, podemos distinguir essencialmente três fases fundamentais :

1. aquisição das coordenadas dos elementos representativos da peça;
2. utilização de algoritmos numéricos adequados para a determinação da forma e dimensões da peça fabricada;
3. determinação do desvio desta em relação à peça projectada.

A primeira fase será tratada na secção (1.2) e as duas últimas em (1.3).

Actualmente, a *metrologia por coordenadas* ocupa uma posição sólida na indústria. Isso só foi possível através de um desenvolvimento sistemático nos últimos 25 anos, proporcionado pelo avanço tecnológico que se tem feito sentir. A sua aplicação universal e o seu alto grau de automatização têm sido as principais razões desse sucesso.

Existem vários sistemas de aquisição de coordenadas. Descreveremos de seguida os mais usados na prática.

1.2. Sistemas de aquisição de coordenadas

A máquina de medição de coordenadas (CMM - “Coordinate Measuring Machine”) é o instrumento mais utilizado para a aquisição de coordenadas. No entanto, devido especialmente ao seu limitado alcance de medição a CMM é, por vezes, substituída por outros sistemas de aquisição, especialmente quando o objecto a medir é de grandes dimensões.

1.2.1. Máquinas de medição de coordenadas (CMM)

Uma CMM executa a medição de coordenadas segundo um processo baseado directamente no conceito de sistema de coordenadas no espaço. Esse sistema de coordenadas é materializado pela estrutura da máquina e pelo movimento das suas componentes.

Uma máquina de medição é constituída por uma base fixa e estável sobre a qual assentam três componentes básicas da sua estrutura que são normalmente a mesa de medição, o pórtico e o braço (ver fig.1.1). Algumas dessas componentes são móveis por forma a permitirem que qualquer ponto, dentro do domínio de medição da máquina, possa ser alcançado pelo mecanismo de localização de pontos.

Quando o sistema de registo de dados é accionado, a leitura de coordenadas é feita automaticamente em três escalas lineares graduadas que estão associadas respectivamente a cada uma das componentes que materializam os eixos de referência. Normalmente, o sistema de registo é accionado mecanicamente, pelo toque do mecanismo de localização sobre a superfície do objecto em medição. Porém, existem actualmente outros sistemas de registo que são accionados por sistemas ópticos de localização, tal como raios laser reflectidos na superfície do objecto, evitando assim o contacto com o objecto.

As leituras sobre as escalas lineares são submetidas ainda a várias correcções com o objectivo de eliminar erros devidos, não só a defeitos de construção da máquina, mas também à variação das condições ambiente e a outras possíveis características específicas da CMM.

Em geral, a máquina está ligada a um computador que, para além de desempenhar um papel essencial na fase de processamento das coordenadas, pode ainda controlar a CMM durante a aquisição destas.

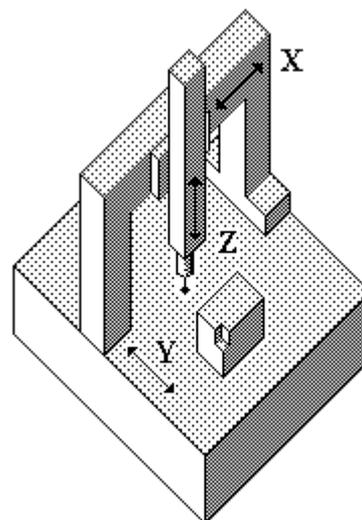


Figura 1.1 Máquina de Medição de Coordenadas (CMM).

1.2.2. Sistemas móveis

Por oposição à CMM, que está instalada numa posição estacionária, os outros sistemas de aquisição de coordenadas, que irão ser descritos, costumam-se designar por sistemas móveis de aquisição de coordenadas. Trata-se de sistemas portáteis que são montados em redor do objecto a medir.

Sistema Móvel 3D

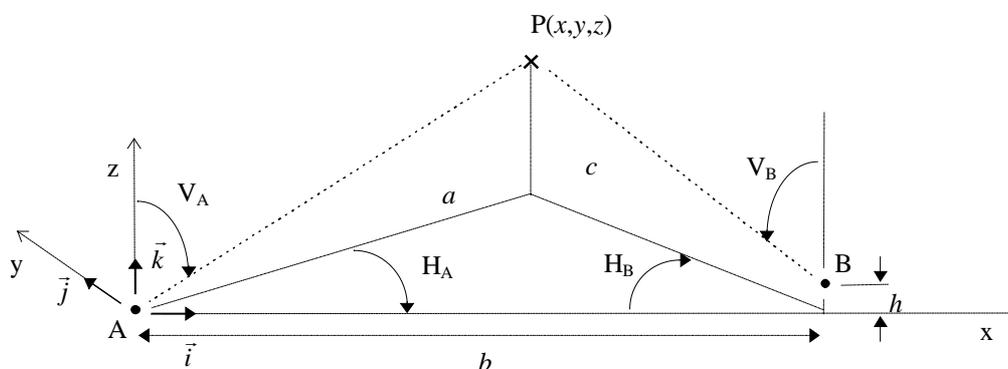


Figura 1.2 Sistema Móvel de Medição

Neste caso, as coordenadas de um ponto P qualquer são obtidas indirectamente, através da medição de ângulos horizontais e verticais por teodolitos segundo o esquema da figura (1.2), uma vez que apontando os dois aparelhos para o ponto P se podem medir os ângulos horizontais H_A e H_B e os ângulos verticais V_A e V_B representados na figura. O ponto P é obtido pela intersecção de duas linhas de pontaria feitas a partir de posições diferentes (A e B , neste caso).

De uma forma geral, as coordenadas de P são consideradas em relação ao sistema de referência directo $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, com origem coincidente com o ponto A (centro do teodolito) e plano $O \vec{i} \vec{k}$, vertical, contendo os pontos A e B (centros dos teodolitos), sendo \vec{k} o vector director da vertical de A no sentido ascendente e \vec{i} o vector horizontal apontado de A para a vertical de B .

Relativamente a este referencial, teremos então $A \equiv (0,0,0)$ e $B \equiv (b,0,h)$, sendo b a distância horizontal entre os ponto A e B e h a sua diferença de nível.

Assim sendo, podem-se obter as coordenadas de P a partir das relações

$$\begin{cases} x = a \cos H_A \\ y = a \sin H_A \\ z = (z_1 + z_2) / 2 \end{cases},$$

com $a = b \frac{\sin H_B}{\sin(H_A + H_B)}$, $z_1 = a \cot V_A$, $z_2 = c \cot V_B + h$ e $c = b \frac{\sin H_A}{\sin(H_A + H_B)}$.

Os valores de b e de h são determinados durante a calibração do sistema.

Usando teodolitos electrónicos ligados a um computador, conjugados com algoritmos mais elaborados para o cálculo das coordenadas, pode-se obter um sistema de aquisição de coordenadas bastante eficiente que pode atingir precisões absolutas da ordem do milímetro. Por vezes utilizam-se mais de dois teodolitos.

Para além da possibilidade de medir peças de grande porte, este sistema tem ainda a vantagem de não necessitar de um contacto mecânico com o objecto a medir, o que é bastante útil no caso dele ser facilmente deformável.

Sistema fotogramétrico

Neste caso, os teodolitos são substituídos por uma câmara fotográfica. Em vez de se medirem ângulos tiram-se fotografias ao mesmo ponto a partir de posições diferentes. No entanto, o princípio subjacente é o mesmo do sistema anterior : o ponto é obtido pela intersecção de duas rectas; só que neste caso os dois pontos que definem as rectas são o centro óptico da máquina fotográfica e a imagem do ponto na fotografia.

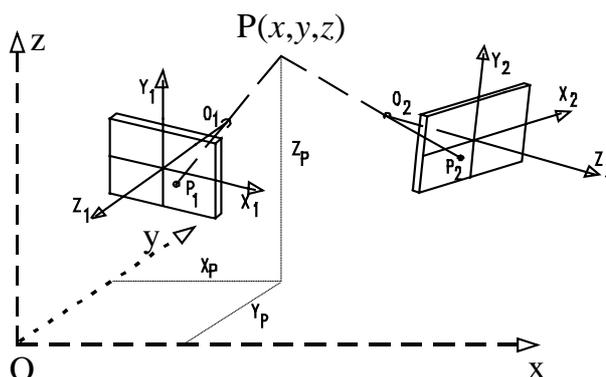


Figura 1.3 Sistema Fotogramétrico .

Apesar de serem usados vários referenciais ligados às fotografias durante o processamento, as coordenadas finais de cada ponto P são transformadas para um sistema de referência único e normalmente ligado ao objecto a medir.

Este sistema é bastante usado no levantamento de fachadas de edifícios.

Sistema de fios

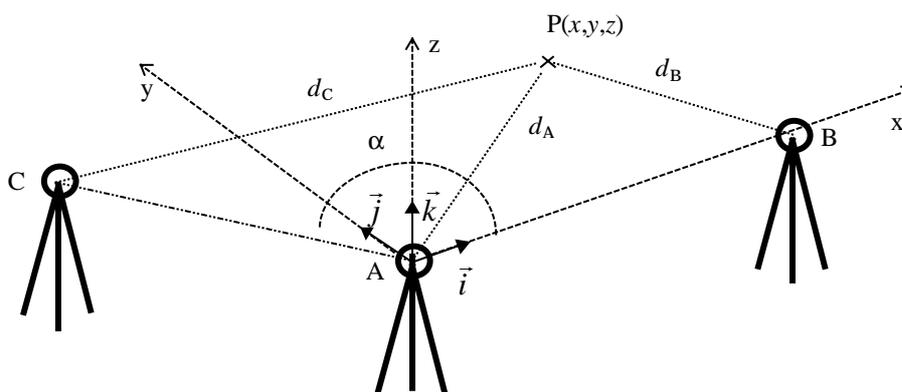


Figura 1.4 Sistema de Fios.

O princípio em que assenta este sistema é muito simples : baseia-se apenas na medição das distâncias d_A , d_B e d_C do ponto P, de coordenadas (x, y, z) a determinar, a outros 3 pontos - A, B, C - de coordenadas conhecidas (ver figura 1.4). As coordenadas de P são então obtidas a partir da resolução do sistema não linear

$$\begin{cases} (x - x_A)^2 + (y - y_A)^2 + (z - z_A)^2 = d_A^2 \\ (x - x_B)^2 + (y - y_B)^2 + (z - z_B)^2 = d_B^2 \\ (x - x_C)^2 + (y - y_C)^2 + (z - z_C)^2 = d_C^2 \end{cases}$$

em que (x_A, y_A, z_A) , (x_B, y_B, z_B) e (x_C, y_C, z_C) são as coordenadas dos pontos A, B e C, respectivamente.

As distâncias são medidas por fios extensíveis que saem dos pontos A, B e C e que estão unidos numa extremidade que vai tocar o ponto P. Cada um dos 3 fios está enrolado num carroto que faz parte de um dispositivo que permite ler e registar electronicamente as distâncias. Os dispositivos são normalmente montados sobre tripés.

Os pontos A, B e C é que vão definir o referencial interno $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ do sistema (figura(1.4)) : a origem coincide com o ponto A e

$$\vec{i} = \frac{\vec{AB}}{\|\vec{AB}\|}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{AB} \times \vec{AC}}{\|\vec{AB} \times \vec{AC}\|} \quad \text{e} \quad \vec{j} = \vec{k} \times \vec{i}^\dagger,$$

obtém-se assim um sistema de coordenadas cartesiano positivo. Por conseguinte, as coordenadas dos pontos A, B e C serão, respectivamente, $(0,0,0)$, $(\overline{AB}, 0, 0)$ e $(\overline{AC} \cos \alpha, \overline{AC} \sin \alpha, 0)$. Os valores de $\cos \alpha$ e de $\sin \alpha$ podem ser obtidos a partir da relação

$$\cos \alpha = \frac{\overline{AB}^2 + \overline{AC}^2 - \overline{BC}^2}{2 \overline{AB} \overline{AC}}.$$

Para isso, é necessário então medir as distâncias \overline{AB} , \overline{AC} e \overline{BC} antes de se iniciar a aquisição de coordenadas. Isso pode ser feito usando também os fios.

Usado inicialmente apenas em arqueologia, este sistema tem-se revelado bastante eficiente em muitas circunstâncias. Apesar de estar muito além da precisão da CMM e mesmo do sistema 3D anterior, tem as vantagens de ser muito menos dispendioso, e simples de usar. Por isso, tem sido desenvolvido desde 1993 pela empresa alemã Meywald.

[†] Por $\vec{u} \times \vec{v}$ representamos, neste trabalho, o produto vectorial de \vec{u} por \vec{v} .

1.3 O problema do ajustamento a uma dada colecção de pontos de certos tipos de elementos geométricos previamente escolhidos

Em *metrologia por coordenadas* considera-se que o projecto idealizado de uma peça pode ser descrito pela união de um número finito de m superfícies (ou curvas) S_k ($k=1, 2, \dots, m$), definidas, cada uma delas, num dado referencial por um conjunto de parâmetros da forma $U_k = (u_{k1}, u_{k2}, \dots, u_{kn_k})$.

Assim, o projecto de uma peça pode ser definido por um número finito $N = \sum_{k=1}^m n_k$ de parâmetros.

Por conseguinte, se um projecto é dado em termos de m superfícies $S_k \equiv (u_{k1}, u_{k2}, \dots, u_{kn_k})$, a peça real a medir será constituída por m superfícies $S'_k \equiv (u'_{k1}, u'_{k2}, \dots, u'_{kn_k})$. São os valores $u'_{k1}, u'_{k2}, \dots, u'_{kn_k}$ para os parâmetros definidores de S'_k ($k=1, 2, \dots, m$) que se pretendem determinar e isso é feito a partir de um conjunto de pontos representativos dessa superfície,

$$P_k = \{(x_{ki}, y_{ki}, z_{ki}) : i = 1, 2, \dots, p_k\}$$

cujas coordenadas são medidas em relação ao referencial interno do sistema de aquisição de coordenadas usado.

Diz-se que os pontos considerados no processo de medição são representativos do elemento geométrico em causa, quando o seu número e distribuição lhes permitem ser uma boa amostra da superfície a medir. Apresentamos alguns exemplos na tabela(1.1) relativos aos elementos geométricos mais comuns em metrologia. A tabela mostra ainda qual o número e distribuição de pontos mais aconselhável, sempre que esses pontos são acessíveis.

As coordenadas transmitidas ao computador são normalmente agrupadas e armazenadas separadamente, associadas ao elemento geométrico a que se referem. Para além dos valores numéricos das coordenadas, também é registado conjuntamente outro tipo de informação, tal como o nome do elemento e a família a que pertence, o referencial em relação ao qual se mediram as coordenadas, etc.

Tabela 1.1

elemento geométrico	nº mínimo de pontos	nº mínimo de pontos recomendável	distribuição de pontos recomendável
plano	3	4	
circunferência	3	4	
esfera	4	6	
cilindro de revolução	5	8	
cone de revolução	6	12	

Considerando então que cada elemento geométrico tem associado um conjunto de pontos representativos, pode-se formular o problema proposto da seguinte forma :

Formulação do problema de ajustamento geral

Dados :

os s pontos P_1, P_2, \dots, P_s , definidos pelas suas coordenadas cartesianas $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$, ($i = 1, 2, \dots, s$), em relação a um dado referencial, medidas sobre a superfície (ou uma porção da superfície) de uma peça e que são razoavelmente precisas e representativas dessa superfície.

Pedidos:

os n parâmetros u_1, u_2, \dots, u_n , ($s \geq n$) que definem a superfície que melhor se ajusta ao conjunto de pontos dados (segundo o critério dos mínimos quadrados).

De uma forma geral, a superfície da peça tem (ou pode ser decomposta em partes que têm) uma forma geométrica conhecida (nos casos mais comuns : esférica, cônica, cilíndrica, etc.), pelo que, na prática, a superfície que melhor se ajusta é procurada de entre uma família de elementos geométricos previamente escolhida (a família das esferas, dos cones, dos cilindros, etc.).

O problema formulado anteriormente pode resolver-se passando pelas seguintes etapas :

1. *Parametrização* : selecção do conjunto de parâmetros u_1, u_2, \dots, u_n capaz de determinar o elemento geométrico a ajustar;
2. Estabelecimento da função erro E a minimizar em termos dos parâmetros u_1, u_2, \dots, u_n :

$$E(u_1, u_2, \dots, u_n) = \sum_{i=1}^s d_i^2(u_1, u_2, \dots, u_n),$$

em que d_i é o desvio do ponto P_i em relação ao elemento geométrico determinado por $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$; de uma forma geral, os desvios são definidos como sendo as distâncias algébricas dos pontos dados ao elemento geométrico ajustado, para assim serem respeitadas as normas usadas em metrologia e para assegurar a diferenciabilidade de d_i em relação aos parâmetros.

3. Construção de algoritmos numéricos que permitam determinar os valores dos parâmetros que minimizam a função E .

Já existem no mercado diversos pacotes de “software” que fazem o ajustamento, tendo em conta o critério dos mínimos quadrados, dos elementos mais frequentemente usados em metrologia : rectas, planos, circunferências, esferas, cilindros e cones de revolução, etc. (ver [1] e [2]).

Os métodos de ajustamento destes elementos costumam-se dividir em dois grupos, consoante se usem ou não processos iterativos.

1.3.1 Processos directos de ajustamento

Ao contrário dos iterativos de que trataremos mais à frente, os processos directos de ajustamento permitem obter a solução do problema através de um número finito de passos. Habitualmente, estes métodos são usados no ajustamento da recta e do plano, como veremos de seguida.

Ajustamento de uma recta

1. Parametrização :

Uma recta pode ser definida por

i) um ponto $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$;

ii) um vector $\vec{v} = (a, b, c)$, unitário, isto é, tal que $a^2 + b^2 + c^2 = 1$.

2. Estabelecimento da função E a minimizar :

O desvio de um ponto $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ à recta r a ajustar, pode ser obtido a partir de

$$d_i^2 = d^2(P_i, r) = \|\vec{P}_0 \vec{P}_i\|^2 - \|\vec{P}' \vec{P}_0\|^2 ;$$

como

$$\|\vec{P}' \vec{P}_0\|^2 = (\vec{P}_0 \vec{P}_i \cdot \vec{v})^2 \dagger$$

vem

$$d_i^2 = \|\vec{P}_0 \vec{P}_i\|^2 - (\vec{P}_0 \vec{P}_i \cdot \vec{v})^2 = \alpha_i^2 - \beta_i^2 ,$$

em que

$$\alpha_i^2 = (x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 + (z_i - z_0)^2 ,$$

$$\beta_i = a(x_i - x_0) + b(y_i - y_0) + c(z_i - z_0) .$$

Logo

$$E(r) = \sum_{i=1}^S d^2(P_i, r) = \sum_{i=1}^S \alpha_i^2 - \sum_{i=1}^S \beta_i^2 .$$

3. Determinação do minimizante de E :

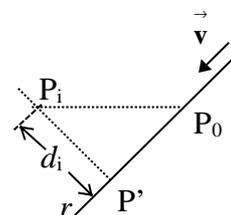


Figura 1.5 Desvio de um ponto a uma recta.

[†] Neste trabalho, $\vec{u} \cdot \vec{v}$ significa o produto escalar entre os vectores \vec{u} e \vec{v} .

Começamos por provar que, se existir, a recta r^* que corresponde ao valor mínimo da função E passa necessariamente pelo baricentro (ou centroide) dos pontos P_i , ($i=1,2,\dots,s$) dados, isto é, pelo ponto

$$\bar{P} \equiv (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}), \quad \text{com} \quad \bar{x} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s y_i \quad \text{e} \quad \bar{z} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s z_i.$$

Baseamos essa demonstração na

Propriedade 1.1:

Seja r uma recta qualquer e r^* uma recta paralela a r e que passa pelo ponto \bar{P} , tem-se que

$$E(r) = E(r^*) + sd^2$$

onde d representa a distância entre as duas rectas.

Para demonstrar esta propriedade escolheu-se, para simplificar, o referencial OXYZ por

forma a que o plano OXY coincida com o plano determinado pelas duas rectas r e r^* e o eixo OX,

com a recta r . Assim, as duas rectas têm o mesmo

vector director $\vec{v} = (1,0,0)$. Além disso, r contém a origem $O \equiv (0,0,0)$ e r^* o ponto $\bar{P} \equiv (\bar{x}, \bar{y}, 0)$.

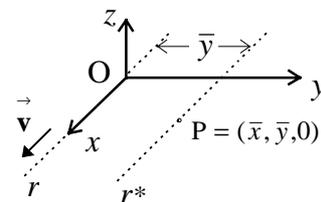


Figura 1.6

As distâncias do ponto $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ a cada uma destas rectas são dadas por

$$d(P_i, r) = \|\vec{v} \times \vec{OP}_i\| = \sqrt{y_i^2 + z_i^2}$$

$$d(P_i, r^*) = \|\vec{v} \times \vec{\bar{P}P}_i\| = \sqrt{(y_i - \bar{y})^2 + z_i^2}.$$

Então,

$$E(r) = \sum_{i=1}^s (y_i^2 + z_i^2)$$

$$E(r^*) = \sum_{i=1}^s [(y_i - \bar{y})^2 + z_i^2] = \sum_{i=1}^s (y_i^2 + z_i^2) + s\bar{y}^2 - 2\bar{y} \sum_{i=1}^s y_i =$$

$$= E(r) - s\bar{y}^2 = E(r) - sd^2(r, r^*)$$

c.q.d.

Sendo $E(r) = E(r^*) + sd^2(r, r^*)$, o valor de $E(r)$ será mínimo quando $d(r, r^*)=0$, isto é, quando r coincide com r^* e, portanto, a recta a que corresponde um mínimo para E passa por \bar{P} .

Consequentemente, para a determinação dessa recta falta apenas encontrar o vector director unitário $\vec{v} = (a, b, c)$.

Atendendo a que α_i^2 , ($i=1, 2, \dots, s$), não depende de (a, b, c) , então minimizar

$$E(r) = \sum_{i=1}^s \alpha_i^2 - \sum_{i=1}^s \beta_i^2,$$

no conjunto de todas as rectas r que passam por \bar{P} , equivale a maximizar

$$\Phi(a, b, c) := \sum_{i=1}^s \beta_i^2,$$

isto sob a condição $a^2 + b^2 + c^2 - 1 = 0$.

Como

$$\begin{aligned} \Phi(a, b, c) &= \sum_{i=1}^s \beta_i^2 = \sum_{i=1}^s [a(x_i - \bar{x}) + b(y_i - \bar{y}) + c(z_i - \bar{z})]^2 = \\ &= a^2 \sum_{i=1}^s (x_i - \bar{x})^2 + 2ab \sum_{i=1}^s [(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})] + 2ac \sum_{i=1}^s [(x_i - \bar{x})(z_i - \bar{z})] + \\ &+ b^2 \sum_{i=1}^s (y_i - \bar{y})^2 + 2bc \sum_{i=1}^s [(y_i - \bar{y})(z_i - \bar{z})] + c^2 \sum_{i=1}^s (z_i - \bar{z})^2, \end{aligned}$$

e definindo as matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} (x_1 - \bar{x}) & (y_1 - \bar{y}) & (z_1 - \bar{z}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (x_s - \bar{x}) & (y_s - \bar{y}) & (z_s - \bar{z}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

pode escrever-se $\Phi(a, b, c)$ na forma matricial

$$\Phi(a, b, c) = \mathbf{v}^T \mathbf{B} \mathbf{v},$$

onde $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ é uma matriz quadrada simétrica, de ordem 3.

Aplicando o método dos multiplicadores de Lagrange para obter os extremos de Φ sob a condição

$$F(a, b, c) = a^2 + b^2 + c^2 - 1 = 0,$$

vem

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial a}(\Phi - \lambda F) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial b}(\Phi - \lambda F) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial c}(\Phi - \lambda F) = 0 \end{cases} .$$

Deste sistema obtém-se a relação

$$\mathbf{B} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} ,$$

em que λ é o multiplicador de Lagrange introduzido.

Pode-se concluir então que se (a_0, b_0, c_0) for um extremo local de Φ então $\mathbf{v}_0 = [a_0 \ b_0 \ c_0]^T$ é um vector próprio de \mathbf{B} e, além disso, o máximo $\Phi(a_0, b_0, c_0)$ é um valor próprio de \mathbf{B} , já que de $\mathbf{B}\mathbf{v}_0 = \lambda\mathbf{v}_0$, vem $\Phi(\mathbf{v}_0) = \mathbf{v}_0^T \mathbf{B} \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0^T \lambda \mathbf{v}_0 = \lambda$ (pois $\mathbf{v}_0^T \mathbf{v}_0 = a^2 + b^2 + c^2 = 1$).

Resumindo :

- os extremos locais condicionados de Φ , se existirem, são valores próprios de \mathbf{B} ;
- o máximo de Φ , se existir, é igual ao maior valor próprio de \mathbf{B} , ao qual estão associados dois vectores próprios unitários e simétricos que tornam Φ máximo. No caso da recta, costuma-se convencionar que o vector director é escolhido de forma a que seja positiva a sua projecção sobre o vector determinado pelo primeiro e pelo último dos pontos dados.

É de salientar que a matriz \mathbf{B} é simétrica, admitindo por isso valores próprios todos reais.

A determinação da recta que melhor se ajusta, no sentido dos mínimos quadrados, a um dado conjunto de pontos, reduz-se então à determinação do

- centroide $\bar{\mathbf{P}}$ desse conjunto de pontos ;
- vector próprio unitário associado ao maior valor próprio de \mathbf{B} .

Pode-se assim construir o seguinte algoritmo :

0. dados s pontos $(x_1, y_1, z_1), \dots, (x_s, y_s, z_s)$, $s \geq 2$,

1. calcular o centroide $\bar{\mathbf{P}} \equiv (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, com $\bar{x} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s x_i$, $\bar{y} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s y_i$ e $\bar{z} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s z_i$;

2. construir a matriz $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$, com \mathbf{A} a matriz cuja linha i é dada por

$$[x_i - \bar{x}, y_i - \bar{y}, z_i - \bar{z}] ;$$

3. determinar um vector próprio unitário $\mathbf{v} = [a \ b \ c]^T$ que corresponde ao maior dos valores próprios de \mathbf{B} .

A recta ajustada passa por $\bar{\mathbf{P}}$ e tem como cossenos directores os elementos a, b, c de \mathbf{v} .

Observações :

1. Existem métodos numéricos que permitem calcular apenas o maior valor próprio de uma matriz, o que evitará o cálculo dos três valores próprios de \mathbf{B} .

2. A hipótese inicial de o conjunto dos pontos dados ser representativo do elemento geométrico em causa assegura a unicidade da solução do problema.

3. Para aumentar a eficiência e a estabilidade do algoritmo pode-se usar a designada decomposição de valores singulares (SVD) da matriz \mathbf{A} como alternativa ao cálculo de \mathbf{B} e dos seus valores próprios, isto porque o vector próprio unitário que corresponde ao maior valor próprio de \mathbf{B} também está associado ao maior valor singular de \mathbf{A} .

Ajustamento de um plano

1. Parametização :

Um plano pode ser definido por

i) um ponto $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$;

ii) um vector $\vec{\mathbf{v}} = (a, b, c)$ unitário (eixo do plano).

2. Estabelecimento da função E a minimizar :

A distância d_i de um ponto $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ ao plano π a ajustar, pode ser dada por

$$d_i = \|\vec{\mathbf{P}} \cdot \vec{\mathbf{P}}_i\| = \vec{\mathbf{P}}_0 \cdot \vec{\mathbf{P}}_i \cdot \vec{\mathbf{v}} = \beta_i ,$$

com

$$\beta_i = a(x_i - x_0) + b(y_i - y_0) + c(z_i - z_0).$$

Logo

$$E(\pi) = \sum_{i=1}^s d^2(P_i, \pi) = \sum_{i=1}^s \beta_i^2 .$$

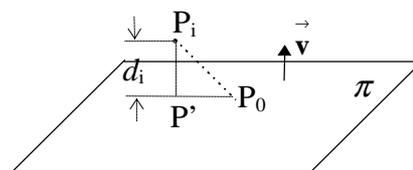


Figura 1.7 Desvio de um ponto a um plano.

É de referir que, ao contrário do caso da recta, aqui é possível definir objectivamente um sinal para o desvio, pois o plano divide o espaço em duas regiões distintas. Assim, costuma-se convencionar que o desvio é negativo quando o ponto P_i está do mesmo lado da peça, em relação ao plano, e positivo caso contrário.

De qualquer das formas, nos casos da recta e do plano a diferenciabilidade de d_i não é necessária ao ajustamento.

3. Determinação dos mínimos locais de E :

Tal como no caso da recta, prova-se que, se existir, o plano π , que corresponde ao valor mínimo da função E , passa necessariamente pelo baricentro \bar{P} (ou centroide) dos pontos P_i , ($i=1,2,\dots,s$) dados (a demonstração é em tudo semelhante àquela que foi feita para o caso anterior da recta).

Falta agora também encontrar o vector unitário $\vec{\mathbf{v}} = (a, b, c)$, isto é, $a^2 + b^2 + c^2 - 1 = 0$, para o qual a soma

$$E(r) = \sum_{i=1}^s \beta_i^2,$$

é mínima.

Considerando aquilo que foi feito para o caso da recta e seguindo a mesma notação, pode-se então concluir que se (a_0, b_0, c_0) torna E máximo então $\vec{\mathbf{v}}_0 = (a_0, b_0, c_0)$ é um vector próprio unitário associado ao menor valor próprio de \mathbf{B} . No caso do plano, costuma-se convencionar que o seu vector director aponta sempre para fora da superfície da peça.

Portanto, a grande diferença entre o algoritmo de ajustamento da recta e o do plano está na escolha do valor próprio de \mathbf{B} .

1.3.2 Processos iterativos de ajustamento

Para além da recta e do plano, não é possível ajustar os outros elementos geométricos usando métodos directos. Nessas situações usa-se normalmente o *Método Iterativo de Gauss-Newton* que se tem revelado até agora como sendo suficientemente eficiente na minimização da função erro E .

Método iterativo de Gauss-Newton

Este método destina-se portanto à determinação de mínimos locais de uma função real de n variáveis reais, suficientemente contínua e diferenciável, da forma

$$\begin{aligned} f: \mathbb{R}^n &\mapsto \mathbb{R} \\ u &\rightarrow f(u) \end{aligned}, \quad u = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n.$$

Seja então $u^0 = (u_1^0, u_2^0, \dots, u_n^0)$ uma aproximação inicial para o minimizante local $u^* = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*)$ de f que vamos supor existir na vizinhança de u^0 . Considerando o desenvolvimento de f em série de Taylor, nessa vizinhança de u^0 ,

$$\begin{aligned} f(u^0 + \delta) &= f(u^0) + \left[\delta_1 \frac{\partial f}{\partial u_1}(u^0) + \delta_2 \frac{\partial f}{\partial u_2}(u^0) + \dots + \delta_n \frac{\partial f}{\partial u_n}(u^0) \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\delta_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_1^2}(u^0) + 2\delta_1 \delta_2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_1 \partial u_2}(u^0) + \dots + \delta_n^2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_n^2}(u^0) \right] + \dots, \end{aligned}$$

onde $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n) \in \mathbb{R}^n$, e definindo a função quadrática

$$\begin{aligned} q: \mathbb{R}^n &\mapsto \mathbb{R} \\ \delta &\rightarrow q(\delta) \end{aligned},$$

por

$$\begin{aligned} q(\delta) &= f(u^0) + \delta_1 \frac{\partial f}{\partial u_1}(u^0) + \delta_2 \frac{\partial f}{\partial u_2}(u^0) + \dots + \delta_n \frac{\partial f}{\partial u_n}(u^0) + \\ &+ \frac{1}{2} \delta_1^2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_1^2}(u^0) + \delta_1 \delta_2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_1 \partial u_2}(u^0) + \dots + \frac{1}{2} \delta_n^2 \frac{\partial^2 f}{\partial u_n^2}(u^0) \end{aligned}$$

obtém-se, desprezando os restantes termos da série,

$$f(u^0 + \delta) \approx q(\delta).$$

Consequentemente, o mínimo de f numa vizinhança de u^0 , se existir, é aproximado pelo mínimo da função q na mesma vizinhança.

Se $\delta^0 = (\delta_1^0, \delta_2^0, \dots, \delta_n^0)$ for o minimizante pretendido, então

$$\frac{\partial q}{\partial \delta_j}(\delta^0) = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, n),$$

isto é,

$$0 = \frac{\partial q}{\partial \delta_j}(\delta^0) = \frac{\partial f}{\partial u_j}(u^0) + \delta_j^0 \frac{\partial^2 f}{\partial u_j^2}(u^0) + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \delta_j^0 \frac{\partial^2 f}{\partial u_j \partial u_i}(u^0), \quad (j = 1, 2, \dots, n).$$

Obtém-se assim um sistema de n equações lineares nas n incógnitas $\delta_1^0, \delta_2^0, \dots, \delta_n^0$, que

pode ser escrito na forma matricial

$$\mathbf{H}_f(u^0) \delta^0 = -\mathbf{g}_f(u^0),$$

em que

$$\mathbf{H}_f(u^0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial u_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial u_1 \partial u_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial u_1 \partial u_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial u_1 \partial u_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial u_2 \partial u_n} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial u_n^2} \end{bmatrix}_{(u^0)}, \quad \mathbf{g}_f(u^0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial u_n} \end{bmatrix}_{(u^0)} \quad \text{e} \quad \delta^0 = \begin{bmatrix} \delta_1^0 \\ \delta_2^0 \\ \vdots \\ \delta_n^0 \end{bmatrix}.$$

A partir de agora vamos representar sempre por $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ um elemento \mathbf{x} de \mathbb{R}^n e por $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T$ a correspondente matriz-coluna.

A matriz \mathbf{H}_f é pois a matriz hessiana de f e \mathbf{g}_f o seu gradiente.

É de notar que $\mathbf{H}_f(u^0)$ é uma matriz quadrada de ordem n e simétrica cuja não singularidade garantirá a existência e a unicidade da solução δ^0 . Essa solução será assim uma correcção a efectuar sobre a estimativa inicial u^0 no sentido de se obter a aproximação

$$u^1 = u^0 + \delta^0.$$

Para se obter uma nova aproximação bastará resolver o sistema linear

$$\mathbf{H}_f(u^1) \delta^1 = -\mathbf{g}_f(u^1) \quad (1.1)$$

e depois fazer

$$u^2 = u^1 + \delta^1;$$

e assim sucessivamente.

Pode-se assim construir um processo iterativo da seguinte maneira :

- Calcular a matriz $\mathbf{H}_f(u^m)$ e o vector $\mathbf{g}_f(u^m)$;
- Resolver o sistema linear $\mathbf{H}_f(u^m) \delta^m = -\mathbf{g}_f(u^m)$;

c). Calcular a nova aproximação $u^{m+1} = u^m + \delta^m$;

d). $m \leftarrow m + 1$; voltar a 1. enquanto o critério de paragem não for atingido.

Se este processo iterativo for convergente, a sucessão de correcções

$$\delta^0 ; \delta^1 ; \delta^2 , \dots$$

tenderá para o vector nulo, isto é, a sucessão de aproximações

$$u^0 , u^1 , u^2 , \dots$$

tenderá para o valor exacto do minimizante local u^* de f . Isto sugere como critério de paragem a condição de a norma de δ^m estar abaixo de uma dada tolerância.

No caso particular de um problema de ajustamento pelo Método dos Mínimos Quadrados, a função f a minimizar será

$$f(u) \equiv E(u) = \sum_{i=1}^s d_i^2(u) \quad , \text{ com } u = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n \text{ e } s \geq n.$$

Daqui tira-se que

$$\frac{\partial E}{\partial u_j} = 2 \sum_{i=1}^s d_i \frac{\partial d_i}{\partial u_j} \quad , \quad (j = 1, 2, \dots, n).$$

Logo, o gradiente \mathbf{g}_E será então dado por

$$\mathbf{g}_E = 2\mathbf{A}^T \mathbf{d} \quad , \quad (1.2)$$

em que

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial d_1}{\partial u_1} & \frac{\partial d_1}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_1}{\partial u_n} \\ \frac{\partial d_2}{\partial u_1} & \frac{\partial d_2}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_2}{\partial u_n} \\ \frac{\partial d_3}{\partial u_1} & \frac{\partial d_3}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_3}{\partial u_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial d_s}{\partial u_1} & \frac{\partial d_s}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_s}{\partial u_n} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_s \end{bmatrix} \quad ,$$

onde as linhas da matriz \mathbf{A} , de tipo $(n \times s)$, são os gradientes das funções d_i , $(i = 1, 2, \dots, s)$ e, portanto, \mathbf{A} é a matriz jacobiana da função

$$\begin{aligned} \mathbf{d} : \mathbb{R}^n &\mapsto \mathbb{R}^s \\ u &\rightarrow \mathbf{d} = \mathbf{d}(u) \end{aligned} \quad , \quad \mathbf{d}(u) = (d_1(u), d_2(u), \dots, d_s(u)).$$

Quanto à matriz hessiana \mathbf{H}_E , o elemento na coluna j e linha k , $[\mathbf{H}_E]_{jk}$, $(j, k = 1, 2, \dots, n)$ será dado por

$$[\mathbf{H}_E]_{jk} = \frac{\partial^2 E}{\partial u_j \partial u_k} = 2 \sum_{i=1}^s \left(d_i \frac{\partial^2 d_i}{\partial u_j \partial u_k} + \frac{\partial d_i}{\partial u_j} \frac{\partial d_i}{\partial u_k} \right) = 2 \sum_{i=1}^s \left(d_i \frac{\partial^2 d_i}{\partial u_j \partial u_k} \right) + 2 \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial d_i}{\partial u_j} \frac{\partial d_i}{\partial u_k} \right) .$$

Atendendo a que $\frac{\partial d_i}{\partial u_j}$ é o elemento $[\mathbf{A}]_{ij}$ da matriz \mathbf{A} definida atrás, e representando analogamente por $[\mathbf{H}_{d_i}]_{jk}$ o elemento na linha j e na coluna k da matriz hessiana de d_i vem,

$$[\mathbf{H}_E]_{jk} = 2 \sum_{i=1}^s d_i [\mathbf{H}_{d_i}]_{jk} + 2 [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jk} , \quad (j,k = 1,2,\dots,n) ,$$

logo

$$\mathbf{H}_E = 2 \sum_{i=1}^s (d_i \mathbf{H}_{d_i}) + 2 \mathbf{A}^T \mathbf{A} .$$

Tendo em conta a expressão da função E a minimizar, especialmente se a aproximação inicial já estiver perto da solução, cada um dos desvios d_i é geralmente pequeno. Sob esta hipótese, poderemos desprezar a primeira parcela da relação anterior, e tomar

$$\mathbf{H}_E \approx 2 \mathbf{A}^T \mathbf{A} , \quad (1.3)$$

reduzindo-se o sistema linear (1.1), correspondente à m -ésima iteração, a

$$\mathbf{A}^T(u^m) \mathbf{A}(u^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T(u^m) \mathbf{d}(u^m) , \quad (m = 0,1,2, \dots) . \quad (1.4)$$

Para controlar a convergência do método iterativo de Gauss-Newton em cada iteração m costumam utilizar-se algumas das seguintes condições :

- i) $E(u^m) < E(u^{m-1})$;
- ii) $\|\mathbf{d}(u^m)\| < \|\mathbf{d}(u^{m-1})\|$;
- iii) $\|\mathbf{g}_E(u^m)\| < \|\mathbf{g}_E(u^{m-1})\|$, em que $\mathbf{g}_E = \mathbf{A}^T \mathbf{d}$ é o gradiente de E .

A divergência pode ter origem em más estimativas iniciais de u^* ou por os dados serem pouco precisos ou não representativos do elemento geométrico considerado, pondo em causa a aproximação (1.3).

Na prática tem-se constatado que a convergência deste método se verifica e é bastante rápida, se forem usados dados razoavelmente precisos e representativos, assim como boas aproximações iniciais.

Iremos aplicar de seguida o método de *Gauss-Newton* ao ajustamento de alguns dos elementos geométricos mais comuns em metrologia [1] e [2].

Ajustamento de uma esfera

1. Parametrização :

Uma esfera pode ser definida por

- i) centro $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$;
- ii) raio r .

A sequência ordenada dos parâmetros poderá ser assim dada por $u = (x_0, y_0, z_0, r)$.

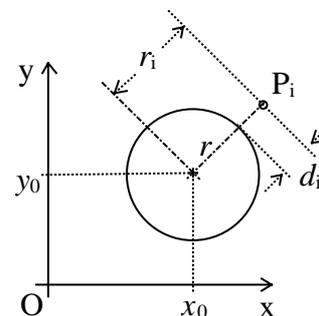


Figura 1.8 Desvio de um ponto a uma esfera.

2. Estabelecimento da função E a minimizar :

O desvio de um ponto $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ à esfera a ajustar, pode ser dado por

$$d_i = r_i - r, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

com

$$r_i = \sqrt{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 + (z_i - z_0)^2}.$$

Portanto, o desvio d_i será positivo ou negativo consoante P_i esteja, respectivamente, fora ou dentro da esfera.

A função a minimizar será dada por,

$$E(u) = \sum_{i=1}^s d_i^2(u) = \sum_{i=1}^s [r_i(u) - r]^2.$$

3. Determinação do minimizante de E :

Vamos usar o método de *Gauss-Newton* descrito atrás. Para isso teremos de estabelecer o sistema linear

$$\mathbf{A}^T(u^m) \mathbf{A}(u^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T(u^m) \mathbf{d}(u^m), \quad (m = 0, 1, 2, \dots),$$

em que $u^m = (x_0^m, y_0^m, z_0^m, r^m)$.

Os s elementos da matriz-coluna $\mathbf{d}(u^m)$ serão dados por

$$d_i(u^m) = r_i(u^m) - r^m, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

com $r_i(u^m) = \sqrt{(x_i - x_0^m)^2 + (y_i - y_0^m)^2 + (z_i - z_0^m)^2}$.

As s linhas da matriz \mathbf{A} são dadas por

$$\left[-\frac{x_i - x_0^m}{r_i^m} \quad -\frac{y_i - y_0^m}{r_i^m} \quad -\frac{z_i - z_0^m}{r_i^m} \quad -1 \right]_{(\mathbf{u}^m)}, \quad (i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S}).$$

4. Determinação da aproximação inicial $\mathbf{u}^0 = (x_0^0, y_0^0, z_0^0, r^0)$:

Consideremos os desvios dos pontos P_i ($i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S}$) dados à esfera a ajustar definidos duma outra forma

$$e_i = r_i^2 - r^2, \quad (i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S}).$$

Tomando $\rho = x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 - r^2$, obtém-se

$$\begin{aligned} e_i &= (x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 + (z_i - z_0)^2 - r^2 = \\ &= -2x_i x_0 - 2y_i y_0 - 2z_i z_0 + \rho + (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2), \quad (i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S}), \end{aligned}$$

que é agora linear em relação aos parâmetros x_0, y_0, z_0 e ρ .

Minimizando a função

$$D(x_0, y_0, z_0, \rho) = \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i^2(x_0, y_0, z_0, \rho),$$

obtêm-se boas estimativas para x_0^0, y_0^0, z_0^0 e $r^0 = \sqrt{x_0^{02} + y_0^{02} + z_0^{02} - \rho^0}$.

Para encontrar um mínimo da função D é necessário que

$$\begin{cases} \frac{\partial D}{\partial x_0}(x_0, y_0, z_0, \rho) = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i \frac{\partial e_i}{\partial x_0} = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i (-2x_i) = 0 \\ \frac{\partial D}{\partial y_0}(x_0, y_0, z_0, \rho) = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i \frac{\partial e_i}{\partial y_0} = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i (-2y_i) = 0 \\ \frac{\partial D}{\partial z_0}(x_0, y_0, z_0, \rho) = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i \frac{\partial e_i}{\partial z_0} = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i (-2z_i) = 0 \\ \frac{\partial D}{\partial \rho}(x_0, y_0, z_0, \rho) = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i \frac{\partial e_i}{\partial \rho} = 2 \sum_{i=1}^{\mathfrak{S}} e_i = 0 \end{cases}.$$

Pode-se então estabelecer o sistema linear

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \mathbf{M}^T \mathbf{b},$$

com

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} -2x_1 & -2y_1 & -2z_1 & 1 \\ -2x_2 & -2y_2 & -2z_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -2x_{\mathfrak{S}} & -2y_{\mathfrak{S}} & -2z_{\mathfrak{S}} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \\ \rho \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) \\ -(x_2^2 + y_2^2 + z_2^2) \\ \vdots \\ -(x_{\mathfrak{S}}^2 + y_{\mathfrak{S}}^2 + z_{\mathfrak{S}}^2) \end{bmatrix},$$

cujas soluções permitirão obter a estimativa pretendida.

Ajustamento de um cilindro de revolução

1. Parametrização :

Um cilindro de revolução pode ser definido por

i) um eixo, que por sua vez pode ser dado por

- um ponto $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$;

- um vector $\vec{v} = (a, b, c)$, unitário, isto é, tal que

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1;$$

ii) raio r .

A sequência ordenada dos parâmetros poderá ser assim dada por $u = (x_0, y_0, z_0, a, b, c, r)$.

2. Estabelecimento da função E a minimizar :

O desvio de um ponto $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ ao cilindro a ajustar, pode ser dado por

$$d_i = r_i - r, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

em que r_i é a distância de P_i ao eixo do cilindro e que pode ser dado por

$$r_i = \left\| \vec{v} \times \vec{P}_0 P_i \right\| = \sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2},$$

sendo

$$\begin{cases} u_i = c(y_i - y_0) - b(z_i - z_0) \\ v_i = a(z_i - z_0) - c(x_i - x_0) \\ w_i = b(x_i - x_0) - a(y_i - y_0) \end{cases}.$$

Assim, cada desvio

$$d_i = \sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2} - r$$

é função de 7 parâmetros (não todos independentes) :

- x_0, y_0, z_0 , as 3 coordenadas de um ponto arbitrário sobre o eixo do cilindro;
- a, b, c , as 3 componentes do vector director do eixo;
- r , o raio do cilindro.

Como já foi dito, estes parâmetros não são todos independentes, podem-se estabelecer entre eles as seguintes relações :

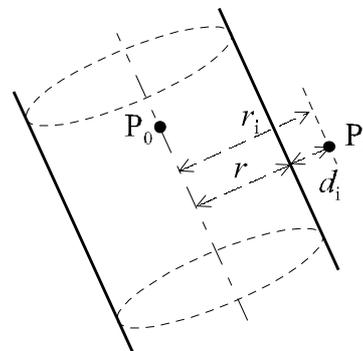


Figura 1.9 Desvio de um ponto a um cilindro.

$a^2+b^2+c^2 = 1$, pelo facto de se tratarem das componentes de um vector unitário;

$a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0$, se o ponto P_0 for escolhido por forma a que seja o ponto do eixo mais próximo da origem.

Portanto, a função a minimizar neste caso será

$$E(u) = \sum_{i=1}^s d_i^2(u) = \sum_{i=1}^s [r_i(u) - r]^2,$$

que é uma função de 7 variáveis reais $u = (x_0, y_0, z_0, a, b, c, r)$ ligadas pelas 2 condições

$$a^2+b^2+c^2 = 1 \quad \text{e} \quad a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0.$$

3. Determinação do minimizante de E :

A resolução de um problema deste tipo, de determinação de extremos ligados, passaria normalmente pela utilização do método dos multiplicadores de Lagrange. No entanto, a introdução dos 2 multiplicadores de Lagrange, correspondentes às 2 condições de ligação, iria levar à resolução de um sistema não linear de 9 equações a 9 incógnitas.

Nos casos da recta e do plano, os problemas dos mínimos quadrados correspondentes puderam ser resolvidos sem passar pela resolução do sistema (os problemas correspondentes eram também problemas de determinação de extremos condicionados) e no caso da esfera, resolveu-se o problema usando o método de *Gauss-Newton*, uma vez que não havia condições de ligação para as variáveis.

No caso do cilindro, não podendo obter um resultado simples como nos casos da recta e do plano, vamos tentar reduzi-lo a um problema do tipo obtido no caso da esfera vamos tentar desembaraçar-nos das condições de ligação, exprimindo a função E em termos de 5 parâmetros independentes.

A partir das 2 condições

$$a^2+b^2+c^2 = 1 \quad \text{e} \quad a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0$$

não é possível exprimir as 2 das variáveis em termos das restantes 5, de forma global, já que

- a primeira permite obter a , b ou c em função das outras 2 mas a menos de um sinal;

- a segunda permite determinar uma das 6 em função das restantes mas só se houver à priori a garantia que uma delas é diferente de zero.

No entanto, embora não se possa exprimir globalmente a função E em termos de apenas 5 parâmetros independentes, isso pode ser feito localmente. Por exemplo, se a orientação do eixo do cilindro for tal que c não se aproxime de zero, então pode tomar-se para vector director desse eixo

$$\vec{\mathbf{V}} = (A, B, C), \quad \text{com} \quad \begin{cases} A = a/c \\ B = b/c \\ C = 1 \end{cases}$$

Nas condições impostas diremos que o cilindro é *quase vertical*.

Esta mudança no vector director do eixo não vem alterar a condição imposta sobre a escolha do ponto P_0 do eixo. Continua a ter-se

$$Ax_0 + By_0 + z_0 = 0,$$

o que permite exprimir z_0 em função dos restantes parâmetros

$$z_0 = -Ax_0 - By_0.$$

Considerando então o caso de um cilindro *quase vertical* podemos reformular a parametrização anterior, agora com 5 parâmetros independentes, que serão :

- i) um vector $\vec{\mathbf{v}}' = (A, B, 1)$, que, em geral, não será unitário;
- ii) um ponto $P_0 \equiv (x_0, y_0, -Ax_0 - By_0)$;
- iii) raio r .

Consequentemente, o desvio

$$d_i = r_i - r,$$

do ponto P_i ao cilindro, terá, em termos dos 5 parâmetros x_0, y_0, A, B, r , a expressão

$$d_i = \sqrt{\frac{U_i^2 + V_i^2 + W_i^2}{A^2 + B^2 + 1}} - r,$$

dado que

$$r_i = \frac{\|\vec{\mathbf{V}} \times \vec{P_0 P_i}\|}{\|\vec{\mathbf{V}}\|} = \sqrt{\frac{U_i^2 + V_i^2 + W_i^2}{A^2 + B^2 + 1}},$$

sendo

$$\begin{cases} U_i = (y_i - y_0) - B[z_i - (-Ax_0 - By_0)] = -ABx_0 - (B^2 + 1)y_0 - Bz_i + y_i \\ V_i = A[z_i - (-Ax_0 - By_0)] - (x_i - x_0) = AB y_0 + (A^2 + 1)x_0 + Az_i - x_i \\ W_i = B(x_i - x_0) - A(y_i - y_0) = -Bx_0 + Ay_0 - Ay_i + Bx_i \end{cases} .$$

Vamos então usar o método de *Gauss-Newton* tal como foi feito para o caso da esfera. Para isso teremos de voltar estabelecer o sistema linear

$$\mathbf{A}^T(\mathbf{U}^m) \mathbf{A}(\mathbf{U}^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T(\mathbf{U}^m) \mathbf{d}(\mathbf{U}^m) , \quad (m = 0, 1, 2, \dots) ,$$

em que agora $\mathbf{U}^m = (x_0^m, y_0^m, A^m, B^m, r^m)$.

Os s elementos da matriz-coluna $\mathbf{d}(\mathbf{U}^m)$ serão dados por

$$d_i(\mathbf{U}^m) = r_i(\mathbf{U}^m) - r^m , \quad (i = 1, 2, \dots, s) ,$$

As s linhas da matriz \mathbf{A} são dadas por

$$\left[\begin{array}{ccccc} \frac{\partial d_i}{\partial x_0} & \frac{\partial d_i}{\partial y_0} & \frac{\partial d_i}{\partial A} & \frac{\partial d_i}{\partial B} & \frac{\partial d_i}{\partial r} \end{array} \right]_{(\mathbf{U}^m)} , \quad (i = 1, 2, \dots, s) ,$$

em que

$$\frac{\partial d_i}{\partial x_0} = \frac{-U_i AB + V_i (A^2 + 1) - W_i B}{r_i (A^2 + B^2 + 1)}$$

$$\frac{\partial d_i}{\partial y_0} = \frac{-U_i (B^2 + 1) + V_i AB + W_i A}{r_i (A^2 + B^2 + 1)}$$

$$\frac{\partial d_i}{\partial A} = \frac{[-U_i Bx_0 + V_i (z_i + 2Ax_0 + By_0) + W_i (y_0 - y_i)](A^2 + B^2 + 1) - A(U_i^2 + V_i^2 + W_i^2)}{r_i (A^2 + B^2 + 1)^2}$$

$$\frac{\partial d_i}{\partial B} = \frac{[-U_i (z_i + Ax_0 + 2By_0) + V_i Ay_0 + W_i (x_0 - x_i)](A^2 + B^2 + 1) - B(U_i^2 + V_i^2 + W_i^2)}{r_i (A^2 + B^2 + 1)^2}$$

$$\frac{\partial d_i}{\partial r} = -1 .$$

As derivadas serão calculadas, na m -ésima iteração, em \mathbf{U}^m .

Estamos agora em condições de efectuar as sucessivas iterações do método até se atingir uma aproximação com suficiente precisão, partindo do princípio de a convergência existe. No entanto, devido à complexidade das expressões obtidas, cada iteração obriga à execução de cálculos bastante pesados, especialmente se se pretende utilizar um computador pessoal.

Uma forma de simplificar os cálculos consiste em aplicar uma transformação de

coordenadas ao conjunto de pontos dados $\{P_i, i=1, 2, \dots, s\}$ que permita passar de $U^m = (x_0^m, y_0^m, A^m, B^m, r^m)$ para $\bar{U}^m = (0, 0, 0, 0, r^m)$; isto corresponde uma mudança de referencial de forma a que OZ coincida com o eixo do cilindro.

Assim, as expressões anteriores ficarão particularmente simplificadas :

$$d_i^m = \sqrt{[\bar{x}_i^m]^2 + [\bar{y}_i^m]^2} - r ,$$

dado que

$$r_i^m = \sqrt{[\bar{x}_i^m]^2 + [\bar{y}_i^m]^2} ,$$

e as s linhas da matriz \mathbf{A} serão agora dadas por

$$\left[\begin{array}{cccc} \frac{-\bar{x}_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{y}_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{x}_i^m \bar{z}_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{y}_i^m \bar{z}_i^m}{r_i^m} & -1 \end{array} \right], (i=1, 2, \dots, s) .$$

Para a m -ésima iteração, a transformação de coordenadas pretendida poderá ser então composta por :

a) uma translação que leve a origem do referencial inicial a coincidir com o ponto de coordenadas (x_0^m, y_0^m, z_0^m) ; as coordenadas transladadas de cada ponto P_i serão então dadas por

$$\begin{cases} \hat{x}_i^m = x_i - x_0^m \\ \hat{y}_i^m = y_i - y_0^m , \\ \hat{z}_i^m = z_i - z_0^m \end{cases}$$

ou, em notação matricial

$$\hat{\mathbf{P}}_i^m = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_0^m \quad (i=1, 2, \dots, s);$$

b) uma rotação que leve o eixo OZ a ser paralelo ao vector director do eixo do cilindro, (a^m, b^m, c^m) . Por sua vez esta rotação pode ser composta por uma rotação em torno de OX que leve o plano XOZ a ficar paralelo ao eixo do cilindro, seguida de uma rotação em torno do eixo OY que leva finalmente OZ a ficar paralelo ao referido eixo.

Por conseguinte, a rotação pode ser expressa pela seguinte matriz ortogonal

$$\mathbf{R}^m = \mathbf{R}_Y^m \mathbf{R}_X^m = \begin{bmatrix} \cos\theta_Y^m & 0 & \sin\theta_Y^m \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta_Y^m & 0 & \cos\theta_Y^m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta_X^m & \sin\theta_X^m \\ 0 & -\sin\theta_X^m & \cos\theta_X^m \end{bmatrix},$$

em que, por exemplo, se $[b^m]^2 + [c^m]^2 \neq 0$,

$$\sin \theta_X^m = \frac{b^m}{\sqrt{[b^m]^2 + [c^m]^2}} \quad , \quad \cos \theta_X^m = -\frac{c^m}{\sqrt{[b^m]^2 + [c^m]^2}}$$

$$\sin \theta_Y^m = -\frac{\sqrt{[b^m]^2 + [c^m]^2}}{\sqrt{[a^m]^2 + [b^m]^2 + [c^m]^2}} \quad , \quad \cos \theta_Y^m = -\frac{a^m}{\sqrt{[a^m]^2 + [b^m]^2 + [c^m]^2}} .$$

Assim, a transformação de coordenadas total será dada por

$$\bar{\mathbf{P}}_i^m = \mathbf{R}^m (\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_0^m) \quad ,$$

sendo $\bar{\mathbf{P}}_i^m = (\bar{x}_i^m, \bar{y}_i^m, \bar{z}_i^m)$ ($i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S}$).

Resumindo, um algoritmo para ajustar um cilindro de revolução pode ser organizado da seguinte forma :

i) Dada uma estimativa inicial $\mathbf{u}^0 = (x_0^0, y_0^0, z_0^0, a^0, b^0, c^0, r^0)$, com $a^2 + b^2 + c^2 = 1$
e

$$a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0 \quad ; \quad m \leftarrow 0 ;$$

ii) Aplica-se a transformação de coordenadas, que leva OZ a coincidir com o eixo do cilindro definido por \mathbf{u}^m , sobre os pontos dados, obtendo-se assim as coordenadas transformadas

$$\bar{\mathbf{P}}_i^m = \mathbf{R}^m (\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_0^m) \quad (i = 1, 2, \dots, \mathfrak{S});$$

iii) Resolve-se o sistema linear

$$\mathbf{A}^T (\bar{\mathbf{U}}^m) \mathbf{A} (\bar{\mathbf{U}}^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T (\bar{\mathbf{U}}^m) \mathbf{d} (\bar{\mathbf{U}}^m) \quad ,$$

obtendo-se a solução que designaremos por $\bar{\delta}^m = [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_r^m]^T$;

iv) Determinação da aproximação seguinte, dada por

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}^{m+1} &= \bar{\mathbf{U}}^m + \bar{\delta}^m = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad r^{m+1}]^T + [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_r^m]^T = \\ &= [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_r^m + r^m]^T ; \end{aligned}$$

v) Passagem para o referencial através da transformação inversa, fazendo

$$\begin{bmatrix} \tilde{x}_0^{m+1} \\ \tilde{y}_0^{m+1} \\ \tilde{z}_0^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0^m \\ y_0^m \\ z_0^m \end{bmatrix} + \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} \bar{\delta}_x^m \\ \bar{\delta}_y^m \\ -\bar{\delta}_a^m \bar{\delta}_x^m - \bar{\delta}_b^m \bar{\delta}_y^m \end{bmatrix} \quad , \quad \begin{bmatrix} \tilde{a}^{m+1} \\ \tilde{b}^{m+1} \\ \tilde{c}^{m+1} \end{bmatrix} = \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} \bar{\delta}_a^m \\ \bar{\delta}_b^m \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad r^{m+1} = r^m + \bar{\delta}_r^m$$

vi) se se pretender que o vector director do eixo continue a ser unitário e que o ponto

P_0 a considerar, desse mesmo eixo, continue a ser o mais próximo da origem há ainda que fazer a passagem

$$\begin{bmatrix} a^{m+1} \\ b^{m+1} \\ c^{m+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{[\tilde{a}^{m+1}]^2 + [\tilde{b}^{m+1}]^2 + [\tilde{c}^{m+1}]^2} \begin{bmatrix} \tilde{a}^{m+1} \\ \tilde{b}^{m+1} \\ \tilde{c}^{m+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_0^{m+1} \\ y_0^{m+1} \\ z_0^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_0^{m+1} \\ \tilde{y}_0^{m+1} \\ \tilde{z}_0^{m+1} \end{bmatrix} - (a^{m+1}\tilde{x}_0^{m+1} + b^{m+1}\tilde{y}_0^{m+1} + c^{m+1}\tilde{z}_0^{m+1}) \begin{bmatrix} a^{m+1} \\ b^{m+1} \\ c^{m+1} \end{bmatrix}$$

Chega-se assim à aproximação seguinte $u^{m+1} = (x_0^{m+1}, y_0^{m+1}, z_0^{m+1}, a^{m+1}, b^{m+1}, c^{m+1}, r^{m+1})$

vii) se o critério de paragem não foi atingido, $m \leftarrow m + 1$, voltar a ii)

4. Determinação da aproximação inicial $u^0 = (x_0^0, y_0^0, z_0^0, a^0, b^0, c^0, r^0)$:

Ao contrário dos casos anteriores, agora irá ser necessário impor uma ordem de entrada aos pontos P_i ($i = 1, 2, \dots, s$) por forma a facilitar o cálculo da estimativa inicial para os parâmetros definidores do cilindro.

Uma das estratégias usadas consiste em tentar medir os 3 primeiros pontos segundo uma circunferência num plano sensivelmente ortogonal ao eixo do cilindro e os 3 seguintes sobre outra circunferência nas mesmas condições e o mais afastada possível da primeira.

Determinando a equação, no plano que a contém, de cada uma destas duas circunferências, podem-se obter as coordenadas dos centros e os raios. Assim, a estimativa para o eixo do cilindro poderá ser obtida a partir dos dois centros, enquanto a aproximação inicial para o raio pode ser dada através da média dos dois raios das circunferências.

Ajustamento de um cone de revolução

1. Parametrização :

Um cone de revolução pode ser definido por

i) um eixo, que por sua vez pode ser dado por

- um ponto $P_0 \equiv (x_0, y_0, z_0)$;

- um vector $\vec{v} = (a, b, c)$, unitário, isto é, tal que $a^2 + b^2 + c^2 = 1$;

ii) ângulo entre o eixo e uma directriz do cone, que designaremos por semi-

amplitude ϕ ;

iii) informação sobre a posição do vértice.

Quanto ao eixo do cone poderemos usar a mesma parametrização que considerámos para o cilindro.

Se em vez de escolher o ponto do eixo mais próximo da origem, fosse seleccionado para P_0 o vértice do cone, ficaríamos logo com o caso iii) resolvido. No entanto, para cones em que ϕ é pequeno o posicionamento do vértice seria pouco preciso. Para evitar esse problema pode-se escolher em vez disso o parâmetro t , definido pela distância de P_0 à superfície do cone, ver figura (1.10). Aqui o problema da estabilidade numérica põe-se para valores de ϕ próximos de $\frac{\pi}{2}$ mas essa estabilidade poderá ser aumentada se o critério na escolha do ponto P_0 sobre o eixo for ligeiramente alterado; ver [Forbes].

A sequência ordenada dos parâmetros definidores do cone poderá ser então dada por $u = (x_0, y_0, z_0, a, b, c, \phi, t)$.

2. Estabelecimento da função E a minimizar :

Designemos e_i como sendo a distância de $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ ao eixo do cone e f_i como a distância do mesmo ponto ao plano ortogonal ao eixo do cone e que passa por P_0 , ver figura (1.10). Projectando estas distâncias sobre a perpendicular à superfície do cone que passa por P_i , facilmente se obtém a expressão do desvio d_i desse ponto P_i ao cone a ajustar, que será dada por

$$d_i = e_i \cos\phi - f_i \sin\phi - t, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

sendo

$$e_i = \|\vec{v} \times \vec{P}_0 \vec{P}_i\| = \sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2},$$

com

$$\begin{cases} u_i = c(y_i - y_0) - b(z_i - z_0) \\ v_i = a(z_i - z_0) - c(x_i - x_0) \\ w_i = b(x_i - x_0) - a(y_i - y_0) \end{cases},$$

e

$$f_i = \vec{P}_0 \vec{P}_i \cdot \vec{v} = a(x_i - x_0) + b(y_i - y_0) + c(z_i - z_0).$$

Portanto, cada desvio

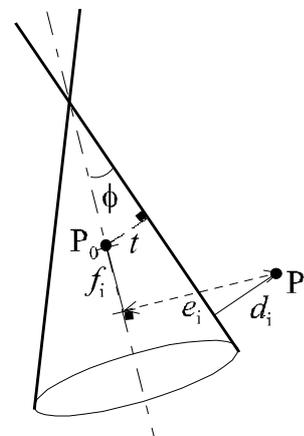


Figura 1.10 Desvio de um ponto a um cone.

$$d_i = e_i \cos\phi - f_i \sin\phi - t$$

é função de 8 parâmetros (não todos independentes) :

- x_0, y_0, z_0 , as 3 coordenadas de um ponto arbitrário sobre o eixo do cilindro;
- a, b, c , as 3 componentes do vector director do eixo;
- ϕ , a semi-amplitude do cone.
- t , que poderemos designar por 'raio' do cone em P_0 .

Como já foi dito, estes parâmetros não são todos independentes, pois podem-se estabelecer entre eles as seguintes relações :

$a^2+b^2+c^2 = 1$, pelo facto de se tratarem das componentes de um vector unitário;

$a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0$, se o ponto P_0 for escolhido por forma a que seja o ponto do eixo mais próximo da origem.

Portanto, a função a minimizar neste caso será inicialmente

$$E(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^s d_i^2(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^s [e_i(\mathbf{u})\cos\phi - f_i(\mathbf{u})\sin\phi - t],$$

que é uma função de 8 variáveis reais $\mathbf{u} = (x_0, y_0, z_0, a, b, c, \phi, t)$ ligadas pelas 2 condições

$$a^2+b^2+c^2 = 1 \quad \text{e} \quad a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0.$$

3. Determinação do minimizante de E :

Seguindo aquilo que foi feito para o caso do cilindro, vamos tentar desembaraçar-nos das condições de ligação, exprimindo a função E em termos de 6 parâmetros independentes para depois tentar resolver o problema usando o método de *Gauss-Newton*.

A partir das 2 condições

$$a^2+b^2+c^2 = 1 \quad \text{e} \quad a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0,$$

vamos exprimir localmente a função E em termos de apenas 6 parâmetros independentes. Tal como no caso do cilindro, se a orientação do eixo do cone for tal que c não se aproxime de zero, então pode tomar-se para vector director desse eixo

$$\vec{\mathbf{V}} = (A, B, C), \quad \text{com} \quad \begin{cases} A = a/c \\ B = b/c \\ C = 1 \end{cases}$$

Nas condições impostas diremos também aqui que o cone é *quase vertical*.

A condição imposta sobre a escolha do ponto P_0 do eixo mantém-se

$$Ax_0 + By_0 + z_0 = 0 ,$$

logo

$$z_0 = -Ax_0 - By_0 .$$

Consequentemente, o desvio

$$d_i = e_i \cos\phi - f_i \sin\phi - t , \quad (i = 1, 2, \dots, s) ,$$

do ponto P_i ao cone, terá, em termos dos 6 parâmetros x_0, y_0, A, B, ϕ, t , a expressão

$$d_i = \sqrt{\frac{U_i^2 + V_i^2 + W_i^2}{A^2 + B^2 + 1}} \cos\phi - \frac{A(x_i - x_0) + B(y_i - y_0) + (z_i - z_0)}{\sqrt{A^2 + B^2 + 1}} \sin\phi - t ,$$

com

$$\begin{cases} U_i = (y_i - y_0) - B[z_i - (-Ax_0 - By_0)] = -ABx_0 - (B^2 + 1)y_0 - Bz_i + y_i \\ V_i = A[z_i - (-Ax_0 - By_0)] - (x_i - x_0) = AB y_0 + (A^2 + 1)x_0 + Az_i - x_i \\ W_i = B(x_i - x_0) - A(y_i - y_0) = -Bx_0 + Ay_0 - Ay_i + Bx_i \end{cases} .$$

Para usar o método de *Gauss-Newton* teremos de estabelecer o sistema linear para este caso

$$\mathbf{A}^T(\mathbf{U}^m) \mathbf{A}(\mathbf{U}^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T(\mathbf{U}^m) \mathbf{d}(\mathbf{U}^m) , \quad (m = 0, 1, 2, \dots) ,$$

em que agora $\mathbf{U}^m = (x_0^m, y_0^m, A^m, B^m, \phi^m, t^m)$.

Os s elementos da matriz-coluna $\mathbf{d}(\mathbf{U}^m)$ serão dados por

$$d_i(\mathbf{U}^m) = r_i(\mathbf{U}^m) - r^m , \quad (i = 1, 2, \dots, s) ,$$

As s linhas da matriz \mathbf{A} são dadas por

$$\left[\frac{\partial d_i}{\partial x_0} \quad \frac{\partial d_i}{\partial y_0} \quad \frac{\partial d_i}{\partial A} \quad \frac{\partial d_i}{\partial B} \quad \frac{\partial d_i}{\partial r} \right]_{(\mathbf{U}^m)} , \quad (i = 1, 2, \dots, s) .$$

Para simplificar os cálculos das derivadas aplicou-se aqui também uma transformação de coordenadas ao conjunto de pontos dados $\{P_i, i = 1, 2, \dots, s\}$ para permitir passar de $\mathbf{U}^m = (x_0^m, y_0^m, A^m, B^m, r^m)$ para $\bar{\mathbf{U}}^m = (0, 0, 0, 0, r^m)$; o que corresponde uma mudança de referencial de forma a que OZ coincida com o eixo do cone e o ponto P_0 com a origem.

A transformação de coordenadas será dada por

$$\bar{\mathbf{P}}_i^m = \mathbf{R}^m (\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_0^m), \quad (1.5)$$

com $\bar{\mathbf{P}}_i^m = (\bar{x}_i^m, \bar{y}_i^m, \bar{z}_i^m)$, ($i = 1, 2, \dots, s$) e \mathbf{R}^m a matriz de rotação correspondente.

Assim, as expressões anteriores tomarão a forma simplificada :

$$d_i^m = r_i^m \cos \phi_i^m - \bar{z}_i^m \sin \phi_i^m - t_i^m,$$

em que agora

$$r_i^m = \sqrt{[\bar{x}_i^m]^2 + [\bar{y}_i^m]^2},$$

e as s linhas da matriz \mathbf{A} serão agora dadas por

$$\left[\begin{array}{cccccc} \frac{-\bar{x}_i^m \cos \phi_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{y}_i^m \cos \phi_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{x}_i^m \varpi_i^m}{r_i^m} & \frac{-\bar{y}_i^m \varpi_i^m}{r_i^m} & \varpi_i^m & -1 \end{array} \right], \quad (i = 1, 2, \dots, s).$$

sendo $\varpi_i^m = \bar{z}_i^m \cos \phi_i^m - r_i^m \sin \phi_i^m$.

Portanto, um algoritmo para ajustar um cone de revolução pode ser organizado da seguinte forma :

i) Dada uma estimativa inicial $\mathbf{u}^0 = (x_0^0, y_0^0, z_0^0, a^0, b^0, c^0, \phi^0, t^0)$, com $a^2 + b^2 + c^2 = 1$

e

$$a x_0 + b y_0 + c z_0 = 0 \quad ; \quad m \leftarrow 0;$$

ii) Aplica-se a transformação de coordenadas (1.5) sobre os pontos dados, obtendo-se assim as coordenadas transformadas

$$\bar{\mathbf{P}}_i^m = \mathbf{R}^m (\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_0^m) \quad (i = 1, 2, \dots, s);$$

iii) Resolve-se o sistema linear

$$\mathbf{A}^T(\bar{\mathbf{U}}^m) \mathbf{A}(\bar{\mathbf{U}}^m) \delta^m = -\mathbf{A}^T(\bar{\mathbf{U}}^m) \mathbf{d}(\bar{\mathbf{U}}^m),$$

obtendo-se a solução que designaremos por $\bar{\delta}^m = [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_\phi^m \quad \bar{\delta}_t^m]^T$;

iv) Determinação da aproximação seguinte, dada por

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}^{m+1} &= \bar{\mathbf{U}}^m + \bar{\delta}^m = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \phi^m \quad t^m]^T + [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_\phi^m \quad \bar{\delta}_t^m]^T = \\ &= [\bar{\delta}_x^m \quad \bar{\delta}_y^m \quad \bar{\delta}_a^m \quad \bar{\delta}_b^m \quad \bar{\delta}_\phi^m + \phi^m \quad \bar{\delta}_t^m + t^m]^T; \end{aligned}$$

v) Passagem para o referencial através da transformação inversa, fazendo

$$\begin{bmatrix} \tilde{x}_0^{m+1} \\ \tilde{y}_0^{m+1} \\ \tilde{z}_0^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0^m \\ y_0^m \\ z_0^m \end{bmatrix} + \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} \bar{\delta}_x^m \\ \bar{\delta}_y^m \\ -\bar{\delta}_a^m \bar{\delta}_x^m - \bar{\delta}_b^m \bar{\delta}_y^m \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \tilde{a}^{m+1} \\ \tilde{b}^{m+1} \\ \tilde{c}^{m+1} \end{bmatrix} = \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} \bar{\delta}_a^m \\ \bar{\delta}_b^m \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\phi^{m+1} = \phi^m + \bar{\delta}_\phi^m \quad \text{e} \quad t^{m+1} = t^m + \bar{\delta}_t^m.$$

vi) se se pretender que o vector director do eixo continue a ser unitário e que o ponto P_0 a considerar, desse mesmo eixo, continue a ser o mais próximo da origem há ainda que fazer a passagem

$$\begin{bmatrix} a^{m+1} \\ b^{m+1} \\ c^{m+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{[\tilde{a}^{m+1}]^2 + [\tilde{b}^{m+1}]^2 + [\tilde{c}^{m+1}]^2} \begin{bmatrix} \tilde{a}^{m+1} \\ \tilde{b}^{m+1} \\ \tilde{c}^{m+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_0^{m+1} \\ y_0^{m+1} \\ z_0^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_0^{m+1} \\ \tilde{y}_0^{m+1} \\ \tilde{z}_0^{m+1} \end{bmatrix} - \left(a^{m+1} \tilde{x}_0^{m+1} + b^{m+1} \tilde{y}_0^{m+1} + c^{m+1} \tilde{z}_0^{m+1} \right) \begin{bmatrix} a^{m+1} \\ b^{m+1} \\ c^{m+1} \end{bmatrix}$$

Chega-se assim à aproximação seguinte $u^{m+1} = (x_0^{m+1}, y_0^{m+1}, z_0^{m+1}, a^{m+1}, b^{m+1}, c^{m+1}, \phi^{m+1}, t^{m+1})$

vii) se o critério de paragem não foi atingido, $m \leftarrow m + 1$, voltar a ii)

4. Determinação da aproximação inicial $u^0 = (x_0^0, y_0^0, z_0^0, a^0, b^0, c^0, \phi^0, t^0)$:

Tal como no caso anterior, aqui também irá ser necessário impor uma ordem de entrada aos pontos P_i ($i = 1, 2, \dots, s$) por forma a facilitar o cálculo da estimativa inicial para os parâmetros definidores do cone.

Uma das estratégias usadas consiste também em tentar medir os 3 primeiros pontos segundo uma circunferência num plano sensivelmente ortogonal ao eixo do cone e os 3 seguintes sobre outra circunferência nas mesmas condições e o mais afastada possível da primeira.

Determinando a equação, no plano que a contém, de cada uma destas duas circunferências, podem-se obter as coordenadas dos centros $C = (c_1, c_2, c_3)$ e $C' = (c_1', c_2', c_3')$ e os respectivos raios r e r' ; consideremos que $r < r'$.

Assim, a estimativa para o eixo do cone poderá ser obtida a partir dos dois centros, fazendo

$$\vec{v}^0 := (a^0, b^0, c^0) = \frac{\vec{CC}'}{\|\vec{CC}'\|} \dagger$$

e

$$\begin{bmatrix} x_0^0 \\ y_0^0 \\ z_0^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} - (a^0 c_1 + b^0 c_2 + c^0 c_3) \begin{bmatrix} a^0 \\ b^0 \\ c^0 \end{bmatrix},$$

se o ponto P_0 for escolhido por forma a ser o ponto do eixo mais próximo da origem.

A aproximação inicial para a semi-amplitude pode ser dada por

$$\phi^0 = \arctan\left(\frac{r' - r}{\overline{CC}'}\right), \quad \phi^0 \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right],$$

enquanto que a estimativa para o parâmetro t pode ser obtida através da expressão

$$t^0 = r^0 \sec \phi^0,$$

sendo

$$r^0 = r + \text{sign}(\alpha) \overline{P_0 C} \tan \phi^0, \quad \text{com } \alpha = -(a^0 c_1 + b^0 c_2 + c^0 c_3).$$

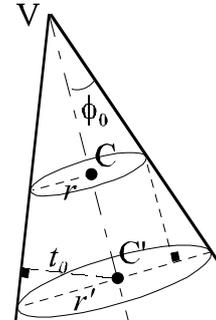


Figura 1.11 Estimativa inicial para o cone.

[†] Neste caso costuma-se convencionar que o vector director do eixo aponta da circunferência de menor raio para a de maior raio.

Capítulo 2

Ajustamento de Quádricas pelo Método dos Mínimos Quadrados

2.1 Introdução

Como vimos no capítulo anterior, existe já “software” para ajustamento de quádricas particulares. Elementos geométricos tais como planos, esferas, cilindros de revolução e cones de revolução são alguns exemplos comuns de quádricas mas esta família é muito mais vasta, contendo as famílias de superfícies elípticas, hiperbólicas e parabólicas.

O objectivo principal deste trabalho consiste em construir um algoritmo geral para obter o elemento geométrico que melhor se ajusta mas na família mais geral das quádricas.

As quádricas são as superfícies que têm como representação analítica, em relação a um certo referencial cartesiano rectangular directo $R \equiv (O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, a equação geral

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz + b_1x + b_2y + b_3z - d = 0. \quad (2.1)$$

em que $a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{12}, a_{13}, a_{23}, b_1, b_2, b_3$ e d representam 10 parâmetros reais (alguns eventualmente nulos).

Para o problema em causa e como veremos mais tarde, na família das quádricas são os elipsóides e os hiperbolóides que podem ser considerados quádricas gerais. Todos os outros tipos de quádricas, como cones, parabolóides, cilindros, etc, serão considerados singularidades que não ocorrem na prática. Por exemplo, em vez de um cilindro elíptico poderá resultar um elipsóide com um eixo muitíssimo maior do que os outros dois.

2.2 Formulação do problema

Consideremos um conjunto de s pontos P_i , ($i = 1, 2, \dots, s$), dados pelas suas coordenadas (x_i, y_i, z_i) num certo referencial cartesiano rectangular directo R , suficientemente representativo do elemento geométrico em causa.

Pretende-se determinar a posição e a forma da quádrlica que *melhor* se aproxima desses pontos no sentido dos *mínimos quadrados*. Isto significa que, de entre todas as quádrlicas, se vai escolher aquela para a qual a soma dos quadrados dos seus desvios aos pontos dados toma o valor mínimo.

Assim, para cada ponto dado $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$, ($i = 1, 2, \dots, s$), deve ser obtida a fórmula para o desvio d_i , de P_i a uma quádrlica geral Q , para depois se minimizar a soma

$$E(Q) = \sum_{i=1}^s d_i^2.$$

Portanto, tal como para o problema de ajustamento dos elementos geométricos analisados no capítulo 1, é necessário ultrapassar as seguintes etapas :

- i) escolha dos parâmetros que descrevem uma quádrlica geral (a sua forma e posição no espaço);
- ii) determinação do desvio de um ponto a uma quádrlica, em termos dos parâmetros definidores desta;

e depois, há ainda que encontrar

- iii) um método numérico eficiente que permita determinar uma boa aproximação para o minimizante de E , considerada função desses parâmetros.

2.3 As Quádrlicas e a sua parametrização

Uma quádrlica pode ser definida implicitamente à custa de uma equação da forma de (2.1) e, portanto, cada quádrlica é completamente definida no referencial R por uma sequência de 10 parâmetros reais

$$(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{12}, a_{13}, a_{23}, b_1, b_2, b_3, d)_{\mathbb{R}},$$

que não são todos independentes : como se pode supor que d não se anula (de facto, d só será nulo se a origem do referencial pertencer à quádrlica, e, nesse caso, basta uma adequada translação da superfície para se ter d não nulo; no final do processo, executa-se a translação inversa para se ter a solução no referencial original), basta dividir ambos os membros da igualdade (2.1) por d para obter apenas 9 parâmetros definidores.

Conclui-se deste modo que qualquer quádrlica pode ser descrita como o lugar geométrico dos pontos $P \equiv (x, y, z)$ do espaço para os quais é nula uma função polinomial em \mathbb{R}^3 de grau

total menor ou igual a 2^\dagger

$$F(x,y,z) = A_{11}x^2 + A_{22}y^2 + A_{33}z^2 + 2A_{12}xy + 2A_{13}xz + 2A_{23}yz + B_1x + B_2y + B_3z - 100. \quad (2.2)$$

A equação

$$F(x,y,z) = 0$$

pode ser escrita na forma matricial, que é frequentemente mais vantajosa :

$$\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} + \mathbf{B}^T \mathbf{P} - 100 = 0, \quad (2.3)$$

com

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{12} & A_{22} & A_{23} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Às matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B} chamamos coeficientes da quádrlica (correspondentes ao termo independente $D = 100$), enquanto que \mathbf{P} é a matriz coluna formada pelas coordenadas do ponto P no referencial R .

Qualquer quádrlica pode ser assim completamente determinada em relação a R por uma sequência ordenada de 9 valores reais

$$(A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3)_R,$$

correspondente ao termo independente $D = 100$.

Embora a forma geral de uma quádrlica Q possa ser caracterizada a partir dos seus coeficientes :

$$Q \equiv (A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3)_R$$

ou seja a partir da sua equação geral (2.2), para $D = 100$, em relação a uma referencial R , essa caracterização é mais simples se se considerar a equação da quádrlica em relação a um referencial conveniente. A mudança de referencial obtém-se por aplicação ao primeiro de uma transformação geométrica que é composta por uma rotação e por uma translação, definidas a partir dos coeficientes da quádrlica. Nos parágrafos seguintes iremos deduzir sucintamente essa equação, dita *equação reduzida de uma quádrlica*.

2.2.1 Redução às direcções principais

$R \equiv (O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ continua a representar um referencial cartesiano rectangular directo. Seja

[†] Escolheu-se $D = 100$ por razões de estabilidade numérica.

$Q \equiv (A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3)_{\mathbb{R}}$, uma quádrlica qualquer definida nesse referencial.

Como \mathbf{A} é uma matriz simétrica, os seus valores próprios, que designaremos por λ , μ e ν , são todos reais. Sejam \vec{v}_1 , \vec{v}_2 e \vec{v}_3 vectores próprios unitários associados respectivamente a λ , μ e ν , considerados de forma a constituírem uma base ortonormada directa. As direcções destes vectores próprios definem as *direcções principais* da quádrlica. Do ponto de vista geométrico, estas direcções representam eixos de simetria da quádrlica.

A redução de Q às direcções principais consiste em passar da equação geral (em relação a \mathbb{R}) para a equação da quádrlica no sistema de referência $\mathbb{R}' \equiv (\mathbf{O}, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$. Esta passagem faz-se através da rotação cuja matriz associada \mathbf{H} tem por colunas as componentes dos vectores próprios \vec{v}_1 , \vec{v}_2 e \vec{v}_3 da matriz \mathbf{A} em relação à base inicial $\{\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$.

A matriz $\mathbf{P}' = [x' \ y' \ z']^T$, cujos termos são as coordenadas no novo referencial \mathbb{R}' do ponto $P \equiv (x, y, z)_{\mathbb{R}}$ é definida através de

$$\mathbf{P}' = \mathbf{H}^T \mathbf{P}, \quad (2.5)$$

donde

$$\mathbf{P} = \mathbf{H} \mathbf{P}',$$

pois \mathbf{H} , sendo uma matriz associada a uma rotação, é ortogonal.

A partir das relações (2.3) e (2.5) obtém-se para equação de Q em relação ao sistema de referência \mathbb{R}'

$$\mathbf{P}'^T \mathbf{A}' \mathbf{P}' + \mathbf{B}'^T \mathbf{P}' - 100 = 0,$$

em que $\mathbf{A}' = \mathbf{H}^T \mathbf{A} \mathbf{H} = \text{diag}[\lambda, \mu, \nu]$, $[B_1' \ B_2' \ B_3'] = \mathbf{B}'^T = \mathbf{B}^T \mathbf{H}$; $D = 100$ mantém-se invariável.

A equação anterior poderá ser escrita na forma

$$\lambda x'^2 + \mu y'^2 + \nu z'^2 + B_1' x' + B_2' y' + B_3' z' - 100 = 0, \quad (2.6)$$

pelo que a quádrlica Q no novo referencial passará a ser determinada por

$$Q \equiv (\lambda, \mu, \nu, 0, 0, 0, B_1', B_2', B_3')_{\mathbb{R}'}.$$

2.2.2 Redução ao centro

Seja então Q uma quádrlica qualquer determinada pela sequência ordenada

$$Q \equiv (\lambda, \mu, \nu, 0, 0, 0, B_1', B_2', B_3')_{R'},$$

no referencial $R' \equiv (O, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$ que lhe está associado.

Estudemos a acção de uma translação do referencial R' nos parâmetros de Q .

Considere-se a translação que desloca a origem do sistema de referência do ponto O para um ponto C qualquer. A matriz-coluna $\mathbf{P}^* = [x^* \ y^* \ z^*]^T$ associada a um ponto P no novo referencial $R^* \equiv (C, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$ está ligada à matriz-coluna $\mathbf{P}' = [x' \ y' \ z']^T$ associada ao mesmo ponto mas no referencial R' pela relação

$$\mathbf{P}^* = \mathbf{P}' - \mathbf{C}' \quad \text{ou} \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P}^* + \mathbf{C}',$$

em que os elementos da matriz-coluna $\mathbf{C}' = [c_1' \ c_2' \ c_3']^T$ são as coordenadas do ponto C no sistema de referência R' , isto é, $\mathbf{C}'^T = \mathbf{H}^T \mathbf{C}$.

No novo referencial R^* , a equação da quádrlica passará a ter a seguinte forma matricial

$$\mathbf{P}^{*T} \mathbf{A}' \mathbf{P}^* + \mathbf{B}^{*T} \mathbf{P}^* - D^* = 0,$$

em que $[B_1^* \ B_2^* \ B_3^*]^T = \mathbf{B}^* = 2\mathbf{A}'\mathbf{C}' + \mathbf{B}'$, $D^* = 100 - (\mathbf{C}'^T \mathbf{A}' \mathbf{C}' + \mathbf{B}'^T \mathbf{C}')$ e \mathbf{A}' mantém-se invariável, ou seja, a quádrlica passa a ter a seguinte equação cartesiana em relação ao referencial R^* :

$$\lambda x^{*2} + \mu y^{*2} + \nu z^{*2} + B_1^* x^* + B_2^* y^* + B_3^* z^* - D^* = 0 \quad (2.7)$$

A equação anterior toma uma forma particularmente simples se o ponto C satisfizer a relação $\mathbf{B}^* = 2\mathbf{A}'\mathbf{C}' + \mathbf{B}' = 0$. Nesse caso, se existir, \mathbf{C}' será solução do sistema linear

$$\mathbf{A}' \mathbf{X} = -\frac{1}{2} \mathbf{B}', \quad \text{isto é,} \quad \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} B_1' \\ B_2' \\ B_3' \end{bmatrix}. \quad (2.8)$$

Sempre que este sistema seja possível, os pontos cujas coordenadas em R' constituem essas soluções designam-se por *centros da quádrlica*.

Os casos mais significativos que poderão surgir são os seguintes :

1º Caso : $\lambda\mu\nu \neq 0$.

A matriz \mathbf{A}' é regular e o sistema anterior é possível e determinado; a quádrlica tem um e um só centro : o ponto C que, no referencial R' , tem por coordenadas

$$\left(-\frac{B'_1}{2\lambda}, -\frac{B'_2}{2\mu}, -\frac{B'_3}{2\nu}\right)_{R'}.$$

No referencial $R^* \equiv (C, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$ a quádrlica terá então a equação simplificada

$$\lambda x^{*2} + \mu y^{*2} + \nu z^{*2} - D^* = 0,$$

com

$$D^* = 100 + \frac{B_1'^2}{4\lambda} + \frac{B_2'^2}{4\mu} + \frac{B_3'^2}{4\nu}.$$

Está-se assim na presença duma quádrlica centrada em que o ponto C é o seu centro. Poderá ser então um elipsóide, um hiperbolóide (de uma ou duas folhas) ou um cone, como mostra a tabela 2.1 .

Tabela 2.1
Tipos de quádrlicas centradas.

λ	μ	ν	D^*	Tipo de quádrlica
> 0	> 0	> 0	> 0	elipsóide
> 0	> 0	< 0	> 0	hiperbolóide de 1 folha
> 0	< 0	< 0	> 0	hiperbolóide de 2 folhas
> 0	> 0	< 0	$= 0$	cone

2º Caso : $\lambda\mu \neq 0, \nu = 0$ e $B_3' \neq 0$.

O sistema (2.8) não tem solução, o que significa que a quádrlica não tem nenhum centro. Trata-se de um parabolóide elíptico ou hiperbólico, quádrlicas não centradas. Neste caso, a equação (2.6) pode ser escrita na forma

$$\lambda \left(x' + \frac{B'_1}{2\lambda}\right)^2 + \mu \left(y' + \frac{B'_2}{2\mu}\right)^2 + B'_3 z' - D^* = 0, \quad D^* = 100 + \frac{B_1'^2}{4\lambda} + \frac{B_2'^2}{4\mu},$$

o que mostra que se escolhermos para origem do novo referencial $R^* \equiv (C, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$ o ponto C , de coordenadas

$$\left(-\frac{B'_1}{2\lambda}, -\frac{B'_2}{2\mu}, \frac{1}{B'_3} \left(100 + \frac{B_1'^2}{4\lambda} + \frac{B_2'^2}{4\mu}\right)\right)_{R'},$$

em R' , a equação da quádrlica reduzir-se-á a

$$\lambda x^{*2} + \mu y^{*2} + B_3' z^* = 0$$

no referencial R^* . Dividindo ambos os membros da equação anterior por B_3' (por hipótese, não nulo) pode-se obter assim a equação geral reduzida do parabolóide

$$\frac{\lambda}{B_3'} x^* + \frac{\mu}{B_3'} y^* + z^* = 0 .$$

3º Caso : $\lambda\mu \neq 0, v = 0$ e $B_3' = 0$.

A matriz A' é então singular e o sistema anterior é possível mas indeterminado.

A quádrlica admite assim uma recta de centros de coordenadas

$$\left(-\frac{B_1'}{2\lambda}, -\frac{B_2'}{2\mu}, z'\right)_{R'}$$

em que z' é um qualquer valor real. Trata-se de um cilindro elíptico ou hiperbólico cujo eixo é a referida recta dos centros.

Por razões de estabilidade numérica, escolheu-se $c_3' = 0$ e no referencial R^* a quádrlica terá agora a equação

$$\lambda x^{*2} + \mu y^{*2} - D^* = 0,$$

com

$$D^* = 100 + \frac{B_1'^2}{4\lambda} + \frac{B_2'^2}{4\mu} .$$

Resumindo :

Através da mudança de coordenadas definida por

$$\mathbf{P}^* = \mathbf{H}^T \mathbf{P} - \mathbf{C}', \quad (2.9.1)$$

com \mathbf{C}' escolhido de acordo com o tipo da quádrlica em questão, a equação geral

$$A_{11} x^2 + A_{22} y^2 + A_{33} z^2 + 2A_{12} xy + 2A_{13} xz + 2A_{23} yz + B_1 x + B_2 y + B_3 z - 100 = 0,$$

pode ser sempre reduzida à forma mais simples

$$\lambda x^{*2} + \mu y^{*2} + \nu z^{*2} + B_3' z^* - D^* = 0, \quad (2.9.2)$$

onde μ, ν, B_3' ou D^* poderão ser eventualmente nulos.

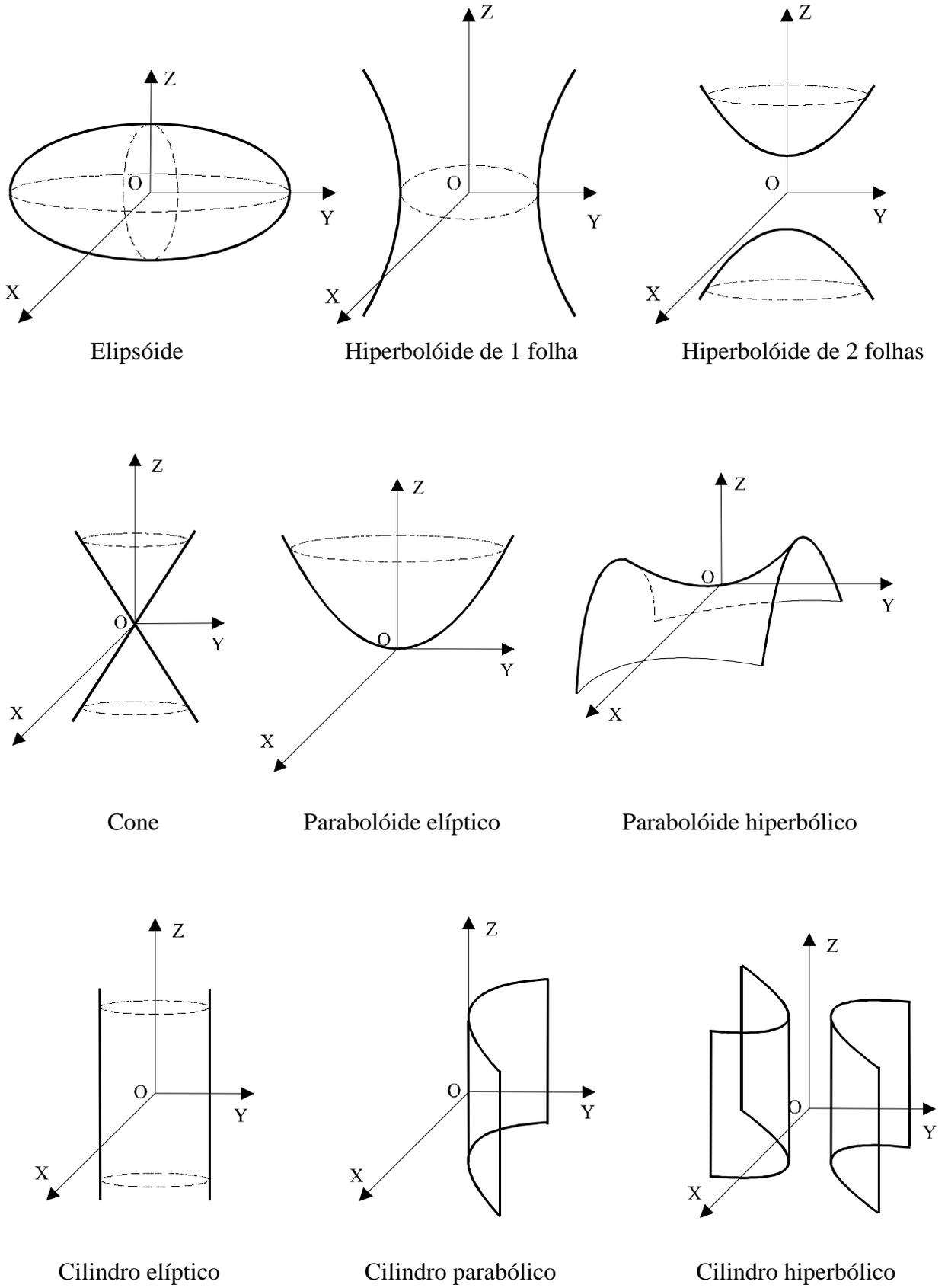


Figura 2.1 Quádricas.

2.4 Desvio de um ponto a uma quádrlica em função dos parâmetros que a definem

Como já foi referido atrás, e a partir de agora, vai-se considerar uma quádrlica Q definida num sistema de coordenadas cartesiano rectangular directo $R \equiv (O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ por uma sequência ordenada de 9 valores reais

$$Q = (A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{23}, A_{13}, A_{12}, B_1, B_2, B_3)$$

correspondentes a $D = 100$ ou, de forma equivalente mas no contexto da notação matricial, pela matriz coluna correspondente

$$Q = [A_{11} \ A_{22} \ A_{33} \ A_{23} \ A_{13} \ A_{12} \ B_1 \ B_2 \ B_3]^T.$$

Os dados serão sempre constituídos por um conjunto de s pontos P_i , ($i = 1, 2, \dots, s$), suficientemente representativos do elemento geométrico em causa e dados pelas suas coordenadas (x_i, y_i, z_i) no mesmo referencial R .

Tal como nos casos já apresentados no capítulo anterior, para nos assegurarmos de que os desvios d_i são diferenciáveis, estes têm de ser definidos como valores algébricos cujos módulos são as distâncias dos pontos à quádrlica.

A distância $|d_i|$ de $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$ a Q , pode ser calculada como sendo a grandeza do vector $\vec{R}_i P_i$ onde $R_i \equiv (X_i, Y_i, Z_i)$ é o ponto da quádrlica Q que está mais próximo de P_i , isto é,

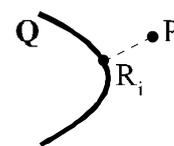


Figura 2.2 Desvio de um ponto a uma quádrlica.

$$\bullet F(X_i, Y_i, Z_i) = 0. \quad (2.10.1)$$

• R_i pertence à normal a Q que passa por P_i , o que significa que

$$\vec{R}_i P_i = \alpha_i \vec{\text{grad}} F(X_i, Y_i, Z_i), \quad (2.10.2)$$

para algum α_i real.

Por conseguinte, uma vez fixado o ponto P_i , vamos definir cada desvio d_i como sendo a função

$$\begin{aligned} d_i : \mathbb{R}^9 &\rightarrow \mathbb{R} \\ Q &\rightarrow d_i(Q) = \alpha_i \left\| \vec{\text{grad}} F(X_i, Y_i, Z_i) \right\|, \quad (i=1, 2, \dots, s) \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde $Q = (A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{23}, A_{13}, A_{12}, B_1, B_2, B_3)$.

O sinal de d_i vai assim depender do de α_i que será positivo ou negativo consoante a região, entre as duas em que a superfície divide o espaço, em que se encontra o ponto P_i . Para se obter cada $d_i(Q)$ vai ser então necessário determinar α_i , X_i , Y_i e Z_i . Tendo em conta as relações (2.10), esses valores podem ser obtidos através da resolução do sistema

$$\begin{cases} F(X_i, Y_i, Z_i) = 0 \\ x_i - X_i = \alpha_i (2A_{11}X_i + 2A_{12}Y_i + 2A_{13}Z_i + B_1) \\ y_i - Y_i = \alpha_i (2A_{12}X_i + 2A_{22}Y_i + 2A_{23}Z_i + B_2) \\ z_i - Z_i = \alpha_i (2A_{13}X_i + 2A_{23}Y_i + 2A_{33}Z_i + B_3) \end{cases} ,$$

isto é, a expressão do desvio $d_i(Q)$ do ponto P_i à quádrlica $Q = (A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{23}, A_{13}, A_{12}, B_1, B_2, B_3)$ em termos dos parâmetros definidores $A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{23}, A_{13}, A_{12}, B_1, B_2$ e B_3 pode ser obtida a partir do seguinte sistema não linear de 4 equações em relação às 4 incógnitas α_i, X_i, Y_i e Z_i :

$$\begin{cases} F(X_i, Y_i, Z_i) = 0 \\ (2\alpha_i A_{11} + 1)X_i + 2A_{12}\alpha_i Y_i + 2A_{13}\alpha_i Z_i = x_i - \alpha_i B_1 \\ 2A_{12}\alpha_i X_i + (2\alpha_i A_{22} + 1)Y_i + 2A_{23}\alpha_i Z_i = y_i - \alpha_i B_2 \\ 2A_{13}\alpha_i X_i + 2A_{23}\alpha_i Y_i + (2\alpha_i A_{33} + 1)Z_i = z_i - \alpha_i B_3 \end{cases} .$$

Seguindo aquilo que foi dito atrás, se se passar do referencial inicial R , onde Q é determinada pela sequência

$$(A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3),$$

para o referencial $R^* \equiv (C, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$ associado a Q e em relação ao qual Q é determinada por

$$(\lambda, \mu, \nu, 0, 0, 0, 0, 0, B_3'),$$

através da mudança de coordenadas referida em (2.9.1), o sistema de equações anterior toma a forma simplificada

$$\begin{cases} \lambda X_i^{*2} + \mu Y_i^{*2} + \nu Z_i^{*2} + B_3' Z_i^* - D^* = 0 \\ (2\alpha_i \lambda + 1)X_i^* = x_i^* \\ (2\alpha_i \mu + 1)Y_i^* = y_i^* \\ (2\alpha_i \nu + 1)Z_i^* = z_i^* - \alpha_i B_3' \end{cases},$$

em que (x_i^*, y_i^*, z_i^*) e (X_i^*, Y_i^*, Z_i^*) são, respectivamente, as coordenadas dos pontos P_i e R_i em relação ao referencial R^* .

É de notar que como d_i e $\|\vec{grad} F(X_i, Y_i, Z_i)\|$ permanecem invariáveis com a mudança de coordenadas, o mesmo acontece a α_i .

Usando as 3 últimas equações, podem-se obter as seguintes igualdades :

$$X_i^* = \frac{x_i^*}{2\alpha_i \lambda + 1}, \quad Y_i^* = \frac{y_i^*}{2\alpha_i \mu + 1}, \quad Z_i^* = \frac{z_i^* - \alpha_i B_3'}{2\alpha_i \nu + 1}, \quad (2.12)$$

que relacionam as primeiras 3 incógnitas - X_i^* , Y_i^* e Z_i^* - com a quarta - α_i . Por sua vez, α_i é solução da equação

$$\frac{\lambda x_i^{*2}}{(2\alpha_i \lambda + 1)^2} + \frac{\mu y_i^{*2}}{(2\alpha_i \mu + 1)^2} + \frac{\nu (z_i^* - \alpha_i B_3')^2}{(2\alpha_i \nu + 1)^2} + B_3' \frac{z_i^* - \alpha_i B_3'}{2\alpha_i \nu + 1} - D^* = 0.$$

Esta equação é equivalente à seguinte equação polinomial de grau 6 em α_i :

$$16\lambda^2 \mu^2 \nu (B_3'^2 + 4\nu D^*) \alpha_i^6 + \\ + 16\lambda \mu (\lambda \mu + \lambda \nu + \mu \nu) (B_3'^2 + 4\nu D^*) \alpha_i^5 -$$

$$\begin{aligned}
& -16 \{ \lambda \mu [\mu v^2 x_i^{*2} + \lambda v^2 y_i^{*2} + \lambda \mu (v z_i^{*2} + B_3' z_i^*)] - 4vD^* (\lambda + \mu + v) - \\
& -(\lambda + \mu) B_3'^2 \} - (\lambda^2 \mu^2 + \lambda^2 v^2 + \mu^2 v^2) D^* - \frac{1}{4} (\lambda^2 + 4\lambda \mu + \mu^2) v B_3'^2 \} \alpha_i^4 + \\
& +16 \{ \lambda \mu [4vD^* - v(\mu + v) x_i^{*2} - v(\lambda + v) y_i^{*2} - (\lambda + \mu) (v z_i^{*2} - B_3' z_i^*)] + \\
& +(\lambda^2 \mu + \lambda \mu^2 + \lambda^2 v + \lambda v^2 + \mu^2 v + \mu v^2) D^* + \frac{1}{4} (\lambda^2 + 4\lambda \mu + \mu^2 + \lambda v + \mu v) B_3'^2 \} \alpha_i^3 + \\
& +4 \{ \lambda (\mu^2 + 4\mu v + v^2) x_i^{*2} + \mu (\lambda^2 + 4\lambda v + v^2) y_i^{*2} + (\lambda^2 + 4\lambda \mu + \mu^2) (v z_i^{*2} + B_3' z_i^*) - \\
& -(\lambda^2 + 4\lambda \mu + \mu^2 + 4\lambda v + v^2 + 4\mu v) D^* - (\lambda + \mu + \frac{1}{4} v) B_3'^2 \} \alpha_i^2 + \\
& +4 \{ \lambda (\mu + v) x_i^{*2} + \mu (\lambda + v) y_i^{*2} + (\lambda + \mu) (v z_i^{*2} + B_3' z_i^*) - (\lambda + \mu + v) D^* - B_3'^2 \} \alpha_i - \\
& -(\lambda x_i^{*2} + \mu y_i^{*2} + v z_i^{*2} + B_3' z_i^* - D^*) = 0
\end{aligned}$$

Tendo em conta o seu significado geométrico, α_i será a solução real com menor valor absoluto desta equação polinomial.

É de notar que, para alguns tipos particulares de quádricas, a equação anterior se simplifica e o grau do polinómio pode ser mais baixo.

Uma vez calculado α_i , será possível obter também X_i^* , Y_i^* e Z_i^* a partir das relações (2.12). As coordenadas (X_i, Y_i, Z_i) podem ser determinadas aplicando a mudança de coordenadas inversa

$$\mathbf{P} = \mathbf{H}(\mathbf{P}^* + \mathbf{C}').$$

sobre (X_i^*, Y_i^*, Z_i^*) , ($i=1, 2, \dots, s$) e a expressão de cada um dos desvios também pode ser obtida a partir dessas coordenadas. Com efeito, como

$$d_i^2(A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{23}, A_{13}, A_{12}, B_1, B_2, B_3) = \|\vec{\mathbf{R}}_i \vec{\mathbf{P}}_i\|^2 = (X_i - x_i)^2 + (Y_i - y_i)^2 + (Z_i - z_i)^2$$

não depende da mudança de referencial, tem-se

$$d_i^2(A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3) = d_i^2(\lambda, \mu, v, 0, 0, 0, 0, 0, B_3'),$$

e usando as relações (2.12), vem

$$\begin{aligned}
 d_i^2 &= (X_i - x_i)^2 + (Y_i - y_i)^2 + (Z_i - z_i)^2 = (X_i^* - x_i^*)^2 + (Y_i^* - y_i^*)^2 + (Z_i^* - z_i^*)^2 = \\
 &= 4\alpha_i^2 \left[\frac{\lambda^2 x_i^{*2}}{(2\alpha_i \lambda + 1)^2} + \frac{\mu^2 y_i^{*2}}{(2\alpha_i \mu + 1)^2} + \frac{(B_3^* + 2\nu z_i^*)^2}{4(2\alpha_i \nu + 1)^2} \right].
 \end{aligned}$$

Finalmente, a expressão

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 &E(A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{12}, A_{13}, A_{23}, B_1, B_2, B_3) = \\
 &= 4 \sum_{i=1}^S \alpha_i^2 \left[\frac{\lambda^2 x_i^{*2}}{(2\alpha_i \lambda + 1)^2} + \frac{\mu^2 y_i^{*2}}{(2\alpha_i \mu + 1)^2} + \frac{(B_3^* + 2\nu z_i^*)^2}{4(2\alpha_i \nu + 1)^2} \right],
 \end{aligned}
 }$$

permite logo obter o valor de E sem ser necessário voltar ao referencial inicial.

2.5 Construção de algoritmos numéricos para a determinação de mínimos locais da função erro $E = \sum_{i=1}^s d_i^2$

2.5.1 Introdução

O problema agora consiste na minimização da função E , a soma dos quadrados das funções não lineares d_i , em relação às 9 variáveis A_{11} , A_{22} , A_{33} , A_{23} , A_{13} , A_{12} , B_1 , B_2 e B_3 .

São conhecidos vários algoritmos numéricos para aproximar a solução deste tipo de problemas.

Numa primeira abordagem e por ser de simples implementação, tentou-se aplicar um algoritmo de minimização que usasse apenas os valores da função E , apesar da previsível baixa eficiência. O principal objectivo era testar a expressão obtida para a função E a minimizar para depois se poder avançar com mais segurança para algoritmos mais complexos e eficientes.

Tentando depois seguir aquilo que tinha sido feito anteriormente para a esfera, o cilindro e o cone, e levando em linha de conta o facto de se tratar também aqui da minimização de uma soma de quadrados, passou-se à implementação do *Método de Gauss-Newton*, já utilizado naqueles casos.

Em relação aos algoritmos de Gauss-Newton e apesar de serem mais específicos do que aqueles que aproximam mínimos locais de funções gerais, não há total unanimidade de que eles sejam os mais eficientes ([6], pg 170 e [12], pg 27). Implementou-se ainda, por isso, um algoritmo para a minimização de uma função geral (não necessariamente uma soma de quadrados), com vista a fazer uma comparação quanto à eficiência destes dois tipos de algoritmos.

Como as rotinas de minimização utilizadas se baseiam em processos iterativos, foi ainda necessário calcular uma estimativa inicial para a solução do problema - os parâmetros da quádrlica ajustada.

São estes os objectivos do presente parágrafo que passaremos a desenvolver, ou seja :

1. Determinação da aproximação inicial;
2. Descrição de um algoritmo numérico para a minimização da função erro E , usando apenas os valores desta;
3. Descrição de um algoritmo numérico para a minimização da função erro E , baseado no método de Gauss-Newton;
4. Descrição de um algoritmo numérico para a minimização da função erro E , que não tem em conta o facto desta ser uma soma de quadrados.

Daqui em diante e para simplificar a notação, passamos a designar as variáveis independentes da seguinte forma :

$$u_1 = A_{11} , u_2 = A_{22} , u_3 = A_{33} , u_4 = A_{12} , u_5 = A_{13} , u_6 = A_{23} ,$$

$$u_7 = B_1 , u_8 = B_2 \text{ e } u_9 = B_3 ,$$

logo,

$$Q = (u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, u_7, u_8, u_9).$$

2.5.2 Determinação da aproximação inicial

Para a determinação da aproximação inicial $Q^0 \equiv (u_1^0, u_2^0, \dots, u_9^0)$ utilizou-se outra definição para os desvios de cada ponto a uma quádrlica, dado que isso vem simplificar significativamente os cálculos, como veremos[†],

$$v_i = F(x_i, y_i, z_i), \quad (i=1, 2, \dots, s). \quad (2.13)$$

Apesar destes valores já não coincidirem, em valor absoluto, com a distância dos pontos $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, \dots, s$, à quádrlica de equação $F(X, Y, Z) = 0$, eles tendem para zero quando a quádrlica se aproxima dos pontos. Por isso, a quádrlica para a qual a soma

[†] Recordamos que a escolha dos desvios d_i teve de ser feita de acordo com as normas aceites em Metrologia.

$$D(Q) = \sum_{i=1}^s v_i^2(Q) \quad (2.14)$$

é mínima constitui, em geral, uma boa aproximação para a solução do problema.

Uma vantagem imediata na consideração desta função erro reside no facto destes novos desvios serem lineares em relação aos parâmetros u_1, u_2, \dots, u_9 , pois

$$v_i = u_1 x_i^2 + u_2 y_i^2 + u_3 z_i^2 + 2u_4 x_i y_i + 2u_5 x_i z_i + 2u_6 y_i z_i + u_7 x_i + u_8 y_i + u_9 z_i - 100, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

Definindo cada uma das s colunas duma matriz \mathbf{M} por

$$[x_i^2 \ y_i^2 \ z_i^2 \ x_i y_i \ x_i z_i \ y_i z_i \ x_i \ y_i \ z_i]_{(i=1,2,\dots,s)}^T,$$

e as matrizes coluna

$$\mathbf{b} = [b_i]_{(i=1,2,\dots,s)}, \quad \text{com } b_i = 100, \quad (i = 1, 2, \dots, s),$$

$$\mathbf{v} = [v_i]_{(i=1,2,\dots,s)} \quad \text{e} \quad \mathbf{u} = [u_j]_{(j=1,2,\dots,9)},$$

de (2.13), vem

$$\mathbf{v} = \mathbf{M} \mathbf{u} - \mathbf{b},$$

e em notação matricial teremos então, para a função erro D

$$D(Q) = \mathbf{v}^T \mathbf{v} = (\mathbf{M} \mathbf{Q} - \mathbf{b})^T (\mathbf{M} \mathbf{Q} - \mathbf{b}). \quad (2.15)$$

Para que $Q^0 = (u_1^0, u_2^0, \dots, u_9^0)$ torne mínimo o valor de D é necessário que o gradiente de D em Q^0 seja nulo, isto é,

$$\frac{\partial D}{\partial u_j}(Q^0) = \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\sum_{i=1}^s v_i^2 \right] (Q^0) = 2 \sum_{i=1}^s [v_i(Q^0) \frac{\partial v_i}{\partial u_j}(Q^0)] = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, 9).$$

Como

$$\left[\frac{\partial v_i}{\partial u_j}(Q^0) \right]_{ij} = \mathbf{M}^T := [m_{ji}]_{ij}, \quad (i = 1, 2, \dots, s; j = 1, 2, \dots, 9),$$

fica

$$\sum_{i=1}^s [m_{ji} v_i(Q^0)] = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, 9),$$

isto é,

$$0 = \mathbf{M}^T \mathbf{v} = \mathbf{M}^T (\mathbf{M} \mathbf{u} - \mathbf{b}).$$

Daqui resulta o designado sistema de *equações normais*

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \mathbf{M}^T \mathbf{b} ,$$

com 9 equações lineares em relação às 9 incógnitas, u_1, u_2, \dots, u_9 , cuja matriz associada - $\mathbf{M}^T \mathbf{M}$ - é simétrica.

Resolvendo este sistema, obtém-se a desejada aproximação inicial Q^0 que, em geral, está já muito perto da aproximação final da solução dada pela minimização de E .

2.5.3 Algoritmo numérico para minimizar a função erro usando apenas os valores da função

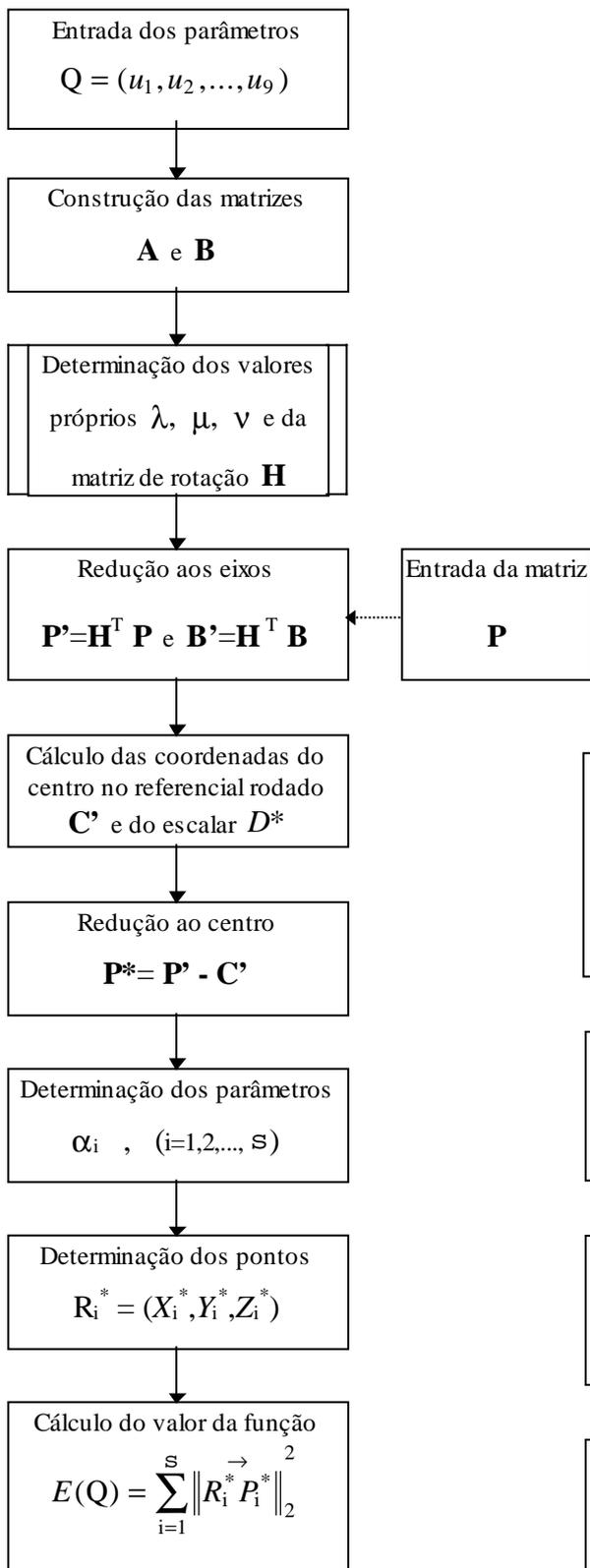
Como já foi referido, logo que se dispôs da expressão de E , tentou-se aproximar imediatamente o mínimo local dessa função através de rotinas numéricas que apenas requeriam os valores da função a minimizar.

A rotina **E04JAF** da NAG está nessas condições.

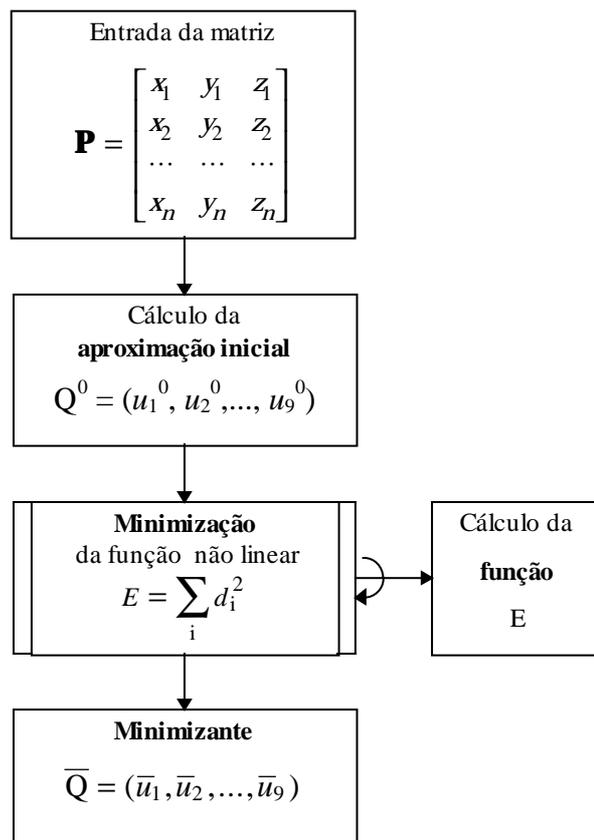
Depois de implementada, esta rotina foi aplicada a conjuntos de pontos cujas coordenadas foram medidas por uma CMM Tesa Micro Xcel sobre superfícies de peças cujas formas se aproximam de quádricas.

Para as formas geométricas mais simples, referidas no capítulo anterior, foi possível fazer uma comparação entre os resultados obtidos e os que são produzidos pelo “software” QUINDOS para um mesmo conjunto de pontos.

A utilização do “software” QUINDOS, tal como outros produtos do mesmo género existentes no mercado, exige, no entanto, que se indique à priori se se trata de uma esfera, um cilindro ou um cone de revolução, sendo o elemento geométrico que melhor se ajusta escolhido apenas na família indicada, enquanto que o algoritmo aqui implementado tem um domínio mais vasto de escolha que é a família das quádricas.



Esquema da rotina para o cálculo da função erro E .



Esquema da rotina geral.

Figura 2.3 Esquema da rotina implementada para o ajustamento de quádricas usando para isso apenas os valores da função erro.

Os resultados obtidos através do algoritmo implementado foram os seguintes[‡] :

I - Para a esfera

Tabela I (esfera)

i	x_i	y_i	z_i	d_i	(Quindos) d_i
1	34.7894	-28.2571	109.2005	+0.0002	+0.0000
2	30.8157	-28.5139	99.7348	-0.0010	-0.0016
3	30.7801	-20.2621	104.4037	+0.0010	+0.0016
4	30.9376	-20.3765	114.0745	-0.0008	+0.0004
5	30.8161	-28.4909	118.8653	+0.0000	-0.0006
6	30.8397	-36.7487	114.1413	+0.0002	-0.0001
7	30.9484	-36.5933	104.4109	+0.0001	+0.0003
8	21.6670	-37.8164	99.5159	+0.0004	+0.0012
9	21.6878	-42.0155	109.5536	+0.0004	+0.0021
10	21.6687	-38.1174	118.7843	-0.0010	-0.0015
11	21.6750	-28.4822	122.7896	+0.0005	-0.0008
12	21.6523	-19.1728	119.0249	+0.0006	+0.0010
13	21.5853	-15.0366	108.9591	-0.0013	-0.0003
14	22.6823	-18.9968	99.8415	+0.0013	+0.0005
15	21.6539	-28.5103	95.8101	-0.0008	-0.0022
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000009	0.000021

Os valores dos parâmetros definidores da quádrica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela I, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$A_{11} = 0.6358 \quad A_{22} = 0.6355 \quad A_{33} = 0.6358$$

$$A_{12} = -0.0001 \quad A_{13} = 0.0000 \quad A_{23} = -0.0001$$

[‡] Em Metrologia a unidade de comprimento usada é normalmente o milímetro (mm). As coordenadas fornecidas pela CMM usada apresentam 4 casas decimais, no entanto, nas condições em que foi usada, a precisão dessas coordenadas não irá muito além das centésimas de milímetro.

$$B_1 = 6.3358 \quad B_2 = 0.0410 \quad B_3 = -0.0325$$

Os valores próprios da matriz \mathbf{A} (2.4) e o escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 0.635832, \quad \mu = 0.635799, \quad \nu = 0.635503 \quad \text{e} \quad D^* = 115.785354.$$

Portanto a quádrlica Q obtida é um elipsóide cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{13.4945^2} + \frac{y^2}{13.4948^2} + \frac{z^2}{13.4980^2} = 1,$$

sendo (21.2974, -28.5256, 109.2995) as coordenadas do seu centro no mesmo referencial.

II - Para o cilindro de revolução

Tabela II (cilindro de revolução)

i	x_i	y_i	z_i	d_i	(Quindos) d_i
1	0.3099	-13.0213	5.2582	+0.0006	+0.0065
2	9.2471	-9.1595	5.2121	-0.0010	+0.0000
3	13.0153	-0.0678	5.3576	-0.0005	+0.0016
4	9.2633	9.1430	4.7462	+0.0011	+0.0013
5	0.3033	13.0199	4.7288	-0.0020	+0.0069
6	0.3410	13.0106	24.6834	+0.0016	-0.0020
7	9.2431	9.1608	24.7187	+0.0007	-0.0008
8	13.0130	0.0614	24.6958	+0.0004	-0.0005
9	9.2467	-9.1526	25.2493	+0.0013	-0.0046
10	0.3279	-13.0146	25.2489	+0.0013	+0.0007
11	0.3665	-13.0140	45.2372	-0.0028	+0.0017
12	9.2302	-9.1719	45.2651	-0.0015	-0.0022
13	13.0143	-0.0779	45.3248	-0.0005	+0.0012
14	9.2480	9.1579	44.7654	-0.0010	+0.0006
15	0.3039	13.0099	44.6766	+0.0006	-0.0041
16	0.3702	13.0083	64.6978	-0.0002	-0.0044
17	9.2338	9.1745	64.7297	-0.0008	+0.0020
18	13.0154	0.1016	64.6671	+0.0007	+0.0027
19	9.2249	-9.1749	65.2327	+0.0012	-0.0034
20	0.3416	-13.0095	65.2150	+0.0008	-0.0031
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000028	0.000199

Os valores dos parâmetros definidores da quádrlica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela II, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$\begin{aligned} A_{11} &= 0.7804 & A_{22} &= 0.7816 & A_{33} &= -0.0001 \\ A_{12} &= -0.0003 & A_{13} &= -0.0001 & A_{23} &= 0.0000 \\ B_1 &= 10.0609 & B_2 &= -0.0028 & B_3 &= 0.0014 \end{aligned}$$

Os valores próprios da matriz A (2.4) e o escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 0.781635, \quad \mu = 0.780326, \quad \nu = -0.000051 \quad \text{e} \quad D^* = 132.373644.$$

Portanto a quádrlica Q obtida é um hiperbolóide de 1 folha cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{13.0136^2} + \frac{y^2}{13.0146^2} - \frac{z^2}{1608.4846^2} = 1,$$

sendo $(-0.0070, -0.0008, 66.9886)$ as coordenadas do seu centro no mesmo referencial.

III - Para o cone de revolução

Os valores dos parâmetros definidores da quádrlica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela III, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$\begin{aligned} A_{11} &= 1.4304 & A_{22} &= 1.4293 & A_{33} &= -0.1029 \\ A_{12} &= -0.0003 & A_{13} &= -0.0008 & A_{23} &= -0.0003 \\ B_1 &= -0.0543 & B_2 &= -0.0177 & B_3 &= 6.4063 \end{aligned}$$

Os valores próprios da matriz A (2.4) e o escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 1.430524, \quad \mu = 1.429245, \quad \nu = -0.102934 \quad \text{e} \quad D^* = 0.325048.$$

Portanto a quádrlica Q obtida é um hiperbolóide de 1 folha cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{0.4767^2} + \frac{y^2}{0.4769^2} - \frac{z^2}{1.7770^2} = 1,$$

sendo (0.0755 , -0.0174 , 51.3774) as coordenadas do seu centro no mesmo referencial.

Tabela III (cone de revolução)

i	x_i	y_i	z_i	d_i	(Quindos) d_i
1	10.7464	0.0394	11.5542	-0.0008	-0.0008
2	5.5927	9.1281	11.5415	+0.0004	+0.0021
3	-5.5228	9.0990	11.5585	+0.0004	-0.0001
4	-10.6440	-0.0971	11.5434	-0.0004	-0.0012
5	-5.5424	-9.1567	11.5147	-0.0001	+0.0026
6	5.6125	-9.1696	11.5302	+0.0006	-0.0003
7	4.4360	-7.1565	20.2345	+0.0004	-0.0012
8	-4.3772	-7.1102	20.2785	+0.0000	+0.0008
9	-8.3137	0.0798	20.2180	+0.0004	-0.0026
10	-4.3903	7.0706	20.2213	-0.0010	+0.0002
11	4.4296	7.1019	20.2695	+0.0009	-0.0001
12	8.4278	-0.0879	20.2264	-0.0007	-0.0016
13	6.0849	-0.1276	28.9882	+0.0015	-0.0022
14	3.2362	5.1027	28.9878	-0.0009	+0.0025
15	-3.1747	5.0508	29.0183	-0.0002	+0.0005
16	-5.9600	-0.0656	28.9919	+0.0012	-0.0019
17	-3.1775	-5.1035	28.9947	-0.0008	+0.0023
18	3.2289	-5.1488	28.9930	-0.0007	+0.0010
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000010	0.000046

No caso destes 3 elementos (esfera e cilindro e cone de revolução) foi possível verificar, por comparação com os resultados obtidos pelo “software” QUINDOS, que o algoritmo implementado parecia estar a produzir resultados coerentes; vejamos alguns exemplos disso:

- no caso da esfera fomos obter um elipsóide com 3 semi-eixos quase iguais; a diferença entre a média dos 3 semi-eixos obtidos e o raio obtido pelo QUINDOS foi de -0.0006;

- no caso do cilindro fomos obter um hiperbolóide de 1 folha com um valor próprio associado praticamente nulo, enquanto que os outros dois são quase iguais ; a diferença entre a média aritmética dos dois semi-eixos respectivos e o raio obtido pelo QUINDOS foi de 0.0015;

- no caso do cone fomos obter um hiperbolóide de 1 folha com um D^* muito pequeno e dois semi-eixos quase iguais; calculando a média desses valores para obter depois a semi-amplitude do cone correspondente e fazendo a diferença com a semi-amplitude dada pelo QUINDOS obtém-se o valor 0.º0260.

Com as boas indicações obtidas atrás, passámos a aplicar esse algoritmo a quádricas mais gerais (elipsóides, hiperbolóides, parabolóides). Para essas quádricas os resultados foram os seguintes :

IV - Para o elipsóide

Os valores dos parâmetros definidores da quádrica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela IV, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$\begin{aligned} A_{11} &= 11.1482 & A_{22} &= 4.0075 & A_{33} &= 2.0471 \\ A_{12} &= 0.0021 & A_{13} &= -0.0038 & A_{23} &= -0.0023 \\ B_1 &= -0.0085 & B_2 &= 0.0003 & B_3 &= 1.4631 \end{aligned}$$

As coordenadas do centro no mesmo referencial são : (-0.0021 , -0.0009 , 0.0073). Os valores próprios da matriz \mathbf{A} (2.4) e do escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 11.148228 \text{ , } \mu = 4.007475 \text{ , } \nu = 2.047095 \text{ e } D^* = 100.261420.$$

Portanto a quádrica Q obtida é um elipsóide cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{2.9989^2} + \frac{y^2}{5.0019^2} + \frac{z^2}{6.9984^2} = 1$$

Tabela IV (elipsóide)

i	x_i	y_i	z_i	d_i
1	3.0015	-0.0024	0.0016	-0.0047
2	-0.0053	5.0053	0.0029	-0.0043
3	0.0036	0.0065	7.0066	-0.0009
4	-3.0041	0.0044	0.0018	-0.0031
5	0.0035	-5.0068	-0.0043	-0.0041
6	-0.0010	-0.0098	-6.9930	-0.0019
7	2.7006	-0.0065	-2.9957	+0.0049
8	-2.7171	-0.0063	-2.9957	-0.0051
9	-0.0087	4.5080	-3.0027	+0.0047
10	-0.0011	-4.5179	-2.9984	+0.0016
11	2.3184	2.3236	-3.0046	-0.0018
12	2.3184	-2.3317	-2.9950	+0.0001
13	-2.3255	2.3212	-2.9969	+0.0007
14	-2.3177	-2.3222	-3.0025	+0.0073
15	2.4587	-0.0040	4.0020	+0.0028
16	-2.4690	0.0047	3.9972	-0.0043
17	-0.0050	4.1073	4.0058	-0.0007
18	-0.0083	-4.1048	3.9988	+0.0021
19	2.1143	2.1054	3.9972	+0.0008
20	2.1131	-2.1063	4.0040	-0.0007
21	-2.1035	2.1207	3.9996	+0.0068
22	-2.1178	-2.1024	3.9937	+0.0002
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000282

V - Para o hiperbolóide de 1 folha

Os valores dos parâmetros definidores da quádrlica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela V, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$A_{11} = 11.0702 \quad A_{22} = 3.9864 \quad A_{33} = -2.0184$$

$$A_{12} = 0.0021 \quad A_{13} = -0.0067 \quad A_{23} = -0.0038$$

$$B_1 = -0.0289 \quad B_2 = 0.0036 \quad B_3 = -1.4398$$

As coordenadas do centro no mesmo referencial são : $(-0.0013, -0.0014, 0.0080)$. Os valores próprios da matriz \mathbf{A} (2.4) e do escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 11.070178, \quad \mu = 3.986397, \quad \nu = -2.018394 \quad \text{e} \quad D^* = 99.743245.$$

Tabela V (hiperbolóide de 1 folha)

i	x_i	y_i	z_i	d_i
1	3.0015	-0.0024	0.0016	-0.0011
2	-0.0053	5.0053	0.0029	-0.0046
3	-2.9964	0.0065	0.0066	+0.0066
4	-0.0041	-4.9956	0.0018	+0.0079
5	3.2674	-0.0068	-3.0043	-0.0048
6	-3.2649	-0.0098	-2.9930	+0.0019
7	-0.0100	5.4333	-2.9957	+0.0019
8	-0.0065	-5.4461	-2.9957	-0.0021
9	2.7901	2.7892	-3.0027	+0.0079
10	2.7977	-2.7991	-2.9984	+0.0006
11	-2.8046	2.7981	-3.0046	-0.0014
12	-2.8047	-2.8062	-2.9950	-0.0041
13	3.4540	-0.0031	4.0031	-0.0003
14	-3.4487	0.0020	3.9975	+0.0015
15	-0.0032	5.7548	4.0020	+0.0006
16	-0.0071	-5.7541	3.9972	-0.0048
17	2.9579	2.9669	4.0058	+0.0021
18	2.9545	-2.9644	3.9988	+0.0039
19	-2.9596	2.9571	3.9972	+0.0008
20	-2.9609	-2.9581	4.0040	-0.0018
21	3.0076	0.0096	-0.0004	-0.0072
22	-3.0067	0.0088	-0.0063	-0.0037
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000359

Portanto a quádrlica Q obtida é um hiperbolóide de 1 folha cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{3.0017^2} + \frac{y^2}{5.0021^2} - \frac{z^2}{7.0297^2} = 1$$

VI - Para o hiperbolóide de 2 folhas

Tabela VI (hiperbolóide de 2 folhas)

i	x_i	y_i	z_i	d_i
1	0.0015	-0.0024	7.0016	+0.0005
2	-0.0053	0.0053	-6.9971	+0.0023
3	3.0642	0.0065	-9.9934	+0.0064
4	-3.0647	0.0044	-9.9982	+0.0015
5	0.0035	5.0942	-10.0043	-0.0048
6	-0.0010	-5.1108	-9.9930	+0.0090
7	2.6145	2.6180	-9.9957	-0.0060
8	2.6179	-2.6307	-9.9957	-0.0020
9	-2.6332	2.6149	-10.0027	+0.0014
10	-2.6255	-2.6248	-9.9984	-0.0019
11	3.6307	-0.0007	10.9954	+0.0012
12	-3.6425	-0.0074	11.0050	-0.0021
13	-0.0012	6.0578	11.0031	-0.0004
14	0.0065	-6.0589	10.9975	+0.0004
15	3.1151	3.1143	11.0020	+0.0001
16	3.1112	-3.1136	10.9972	-0.0021
17	-3.1233	3.1224	11.0058	-0.0010
18	-3.1266	-3.1198	10.9988	+0.0029
19	1.6631	-0.0057	-8.0028	+0.0011
20	-1.6579	0.0048	-7.9960	-0.0013
21	0.0076	2.7760	-8.0004	+0.0070
22	-0.0067	-2.7577	-8.0063	-0.0126
$E = \sum_{i=1}^S d_i^2 =$				0.000429

Os valores dos parâmetros definidores da quádrlica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela VI, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$A_{11} = -11.3761 \quad A_{22} = -4.1003 \quad A_{33} = 2.0912$$

$$A_{12} = 0.0003 \quad A_{13} = -0.0019 \quad A_{23} = 0.0003$$

$$B_1 = -0.0176 \quad B_2 = -0.0235 \quad B_3 = -4.5640$$

As coordenadas do centro no mesmo referencial são : $(-0.0033, -0.0034, 0.0013)$. Os valores próprios da matriz \mathbf{A} (2.4) e do escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = -11.376106, \quad \mu = -4.100252, \quad \nu = 2.091190 \quad \text{e} \quad D^* = 102.490151.$$

Portanto a quádrlica Q obtida é um hiperbolóide de 2 folhas cuja equação reduzida é

$$-\frac{x^2}{3.0015^2} - \frac{y^2}{4.9996^2} + \frac{z^2}{7.0007^2} = 1$$

VII - Para o parabolóide elíptico

Os valores dos parâmetros definidores da quádrlica Q que melhor se ajusta aos pontos cujas coordenadas estão na tabela VII, no referencial em que as coordenadas foram dadas, são :

$$A_{11} = 0.3170 \quad A_{22} = 0.7133 \quad A_{33} = 0.0024$$

$$A_{12} = 0.0001 \quad A_{13} = -0.0001 \quad A_{23} = -0.0027$$

$$B_1 = 0.0017 \quad B_2 = 0.0022 \quad B_3 = -22.8241$$

As coordenadas do centro no mesmo referencial são : $(3.4607, 40.3377, 5021.7124)$.

Os valores próprios da matriz \mathbf{A} (2.4) e do escalar D^* (2.7) associados a Q são :

$$\lambda = 0.713316, \quad \mu = 0.316978, \quad \nu = 0.002380 \quad \text{e} \quad D^* = 54824.428265.$$

Portanto, a quádrlica Q obtida, que, à partida, seria de esperar que fosse um parabolóide elíptico, já que o conjunto de pontos dado era representativo desse tipo de quádrlicas, degenerou num elipsóide desproporcionado cuja equação reduzida é

$$\frac{x^2}{277.2338^2} + \frac{y^2}{415.8845^2} + \frac{z^2}{4799.7448^2} = 1$$

Esta degeneração foi provocada pelo facto de nenhum dos valores próprios se anular totalmente devido aos pontos não pertencerem exactamente a um parabolóide elíptico, o que levou ao ajustamento de um elipsóide e da consequente perda de estabilidade numérica.

Tabela VII (parabolóide elíptico)

i	x_i	y_i	z_i	d_i
1	2.0015	21.9976	222.0016	+0.0014
2	16.6917	22.0053	225.0029	-0.0018
3	-12.6934	22.0065	225.0066	-0.0085
4	1.9959	31.8023	225.0018	+0.0061
5	2.0035	12.1952	224.9957	+0.0043
6	10.1514	30.1426	225.0070	-0.0046
7	10.1424	13.8411	225.0043	-0.0046
8	-6.1589	30.1461	225.0043	-0.0021
9	-6.1611	13.8381	224.9973	+0.0053
10	20.9726	21.9997	227.0016	+0.0008
11	-16.9795	21.9993	226.9954	+0.0052
12	1.9941	34.6417	227.0050	-0.0072
13	1.9988	9.3478	227.0031	+0.0004
14	12.5312	32.5267	226.9975	+0.0075
15	12.5215	11.4713	227.0020	+0.0010
16	-8.5318	32.5294	226.9972	+0.0058
17	-8.5297	11.4794	227.0058	-0.0054
18	24.4416	21.9985	228.9988	-0.0003
19	-20.4467	21.9943	228.9972	-0.0004
20	2.0020	36.9714	229.0040	-0.0031
21	2.0076	7.0430	228.9996	+0.0004
$E = \sum_{i=1}^s d_i^2 =$				0.000418

Concluindo : este processo, apesar de ser pouco eficiente, dado necessitar de um grande número de chamadas da função e de iterações (ver quadro I mais à frente), fornece já resultados que nos permitem avançar com mais segurança para outros processos mais eficientes.

Existem outras rotinas que usam informação explícita sobre as primeiras derivadas, como as que se baseiam no método de Gauss-Newton, que passamos a estudar no parágrafo seguinte.

2.5.4 Algoritmo numérico para minimizar a função erro baseado no método de Gauss-Newton

Tal como já foi feito atrás para a determinação, por ajustamento pelo método dos Mínimos Quadrados, de outras figuras geométricas mais simples, tentou-se em seguida usar o Método de Gauss-Newton para o problema mais geral que estamos agora a analisar.

Portanto, o objectivo agora é a minimização de E , função das variáveis u_1, u_2, \dots, u_9 , usando para isso o Método de Gauss-Newton.

Vai ser então necessário estabelecer a fórmula iterativa desse método que, tendo em conta (1.1), é dada por

$$\mathbf{Q}^{k+1} = \mathbf{Q}^k + \delta^k \quad (k = 0, 1, 2, \dots) ,$$
 com \mathbf{Q}^k a matriz coluna que contém os parâmetros $u_1^k, u_2^k, \dots, u_9^k$ da quádrlica correspondente à k -ésima iteração e δ^k , a solução do sistema linear

$$\mathbf{A}^T(\mathbf{Q}^k) \mathbf{A}(\mathbf{Q}^k) \delta^k = -\mathbf{A}^T(\mathbf{Q}^k) \mathbf{d}(\mathbf{Q}^k) , \quad (2.16)$$

onde

$$\mathbf{d}(Q^k) = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_s \end{bmatrix}_{(Q^k)} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}(Q^k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial d_1}{\partial u_1} & \frac{\partial d_1}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_1}{\partial u_9} \\ \frac{\partial d_2}{\partial u_1} & \frac{\partial d_2}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_2}{\partial u_9} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial d_s}{\partial u_1} & \frac{\partial d_s}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_s}{\partial u_9} \end{bmatrix}_{(Q^k)} .$$

Por conseguinte, vai ser necessário conhecer não só os desvios d_i , ($i=1, 2, \dots, s$), em função dos parâmetros u_j , ($j=1, 2, \dots, 9$), mas também a matriz \mathbf{A} das derivadas parciais desses desvios em relação a esses mesmos parâmetros.

A expressão dos desvios d_i são já conhecidas, falta agora determinar as das derivadas parciais.

Para simplificar, vamos introduzir a notação $g_i := \|\vec{\text{grad}} F(X_i, Y_i, Z_i)\|$, o que leva a escrever os resíduos na forma

$$d_i = \alpha_i g_i, \quad (i=1, 2, \dots, s).$$

Uma vez que α_i e g_i , tal como d_i , são funções de u_1, u_2, \dots, u_9 , derivando em ordem a u_j , obtém-se

$$\frac{\partial d_i}{\partial u_j} = \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} g_i + \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial u_j}, \quad (i=1, 2, \dots, s; j=1, 2, \dots, 9). \quad (2.17)$$

Como

$$g_i = \sqrt{\left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2 + \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2 + \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2},$$

vem,

$$\frac{\partial g_i}{\partial u_j} = \frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \right.$$

(2.18)

$$+ \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \Bigg\}.$$

Mas a relação (2.10.2) pode ser escrita na forma

$$\begin{cases} x_i - X_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \\ y_i - Y_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i), \\ z_i - Z_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \end{cases}$$

e, derivando em ordem a u_j ambos os membros das 3 igualdades, obtém-se[†]

$$\begin{cases} -\left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j}\right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) = \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \\ -\left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j}\right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) = \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right], \\ -\left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j}\right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) = \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \end{cases}, \quad (2.19)$$

dado que, para cada $i \in \{1, 2, \dots, s\}$, as coordenadas X_i , Y_i e Z_i do ponto R_i dependem dos parâmetros u_j .

Então, como de (2.18)

$$\begin{aligned} \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial u_j} = \frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \right\}, \end{aligned}$$

usando as relações (2.19), tira-se que

[†] Sempre que seja necessário distinguir entre derivada total e derivada parcial, vamos considerar que, em geral, que $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)$ representa uma derivada total enquanto que $\frac{\partial f}{\partial x}$ representa uma derivada parcial.

$$\begin{aligned} \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial u_j} = & -\frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \right. \\ & + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \\ & \left. + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Daqui pode-se obter facilmente que

$$\begin{aligned} \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial u_j} = & -\frac{1}{g_i} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} g_i^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Se considerarmos as funções F_i , dos 9 parâmetros u_1, u_2, \dots, u_9 , definidas por

$$F_i = F(X_i, Y_i, Z_i) \quad , \quad (i=1, 2, \dots, s),$$

aplicando o teorema da derivada da função implícita à relação $F(X_i, Y_i, Z_i) = 0$, vem

$$\frac{\partial F_i}{\partial u_j} + \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F_i}{\partial Y_i} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F_i}{\partial Z_i} \left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) = 0 \quad (2.21)$$

E, porque

$$F(X, Y, Z) = u_1 X^2 + u_2 Y^2 + u_3 Z^2 + 2u_4 XY + 2u_5 XZ + 2u_6 YZ + u_7 X + u_8 Y + u_9 Z - 100,$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i}{\partial u_j} = \frac{\partial F}{\partial u_j}(X_i, Y_i, Z_i) \quad , \quad \frac{\partial F_i}{\partial X_i} = \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \quad , \\ \frac{\partial F_i}{\partial Y_i} = \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \quad \text{e} \quad \frac{\partial F_i}{\partial Z_i} = \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \quad , \end{aligned}$$

vem

$$\begin{aligned} & \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + \\ & + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) = - \frac{\partial F}{\partial u_j}(X_i, Y_i, Z_i). \end{aligned}$$

Usando este resultado na relação (2.20), obtém-se

$$\alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial u_j} = \left[\frac{1}{g_i} \frac{\partial F(X_i, Y_i, Z_i)}{\partial u_j} - \frac{\partial \alpha_i}{\partial u_j} g_i \right],$$

pelo que, substituindo na relação (2.17), se obtém finalmente

$$\boxed{\frac{\partial d_i}{\partial u_j} = \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial u_j}(X_i, Y_i, Z_i)} , \quad (i=1, 2, \dots, s ; j=1, 2, \dots, 9). \quad (2.22)$$

Determina-se assim a matriz **A** que será dada por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{X_1^2}{g_1} & \frac{Y_1^2}{g_1} & \frac{Z_1^2}{g_1} & \frac{2X_1Y_1}{g_1} & \frac{2X_1Z_1}{g_1} & \frac{2Y_1Z_1}{g_1} & \frac{X_1}{g_1} & \frac{Y_1}{g_1} & \frac{Z_1}{g_1} \\ \frac{X_2^2}{g_2} & \frac{Y_2^2}{g_2} & \frac{Z_2^2}{g_2} & \frac{2X_2Y_2}{g_2} & \frac{2X_2Z_2}{g_2} & \frac{2Y_2Z_2}{g_2} & \frac{X_2}{g_2} & \frac{Y_2}{g_2} & \frac{Z_2}{g_2} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{X_s^2}{g_s} & \frac{Y_s^2}{g_s} & \frac{Z_s^2}{g_s} & \frac{2X_sY_s}{g_s} & \frac{2X_sZ_s}{g_s} & \frac{2Y_sZ_s}{g_s} & \frac{X_s}{g_s} & \frac{Y_s}{g_s} & \frac{Z_s}{g_s} \end{bmatrix}.$$

Depois de utilizar a rotina **E04YAF** da NAG para verificar numericamente se as expressões das derivadas parciais eram bem calculadas, o que aconteceu com sucesso, foi implementado o Método de Gauss-Newton como foi já descrito no parágrafo (1.3.2), usando na fórmula iterativa correspondente (1.4) as matrizes que acabamos de deduzir. A aproximação inicial foi calculada como se indica no parágrafo (2.5.2).

Por vezes o Método de Gauss-Newton simples revelou-se pouco eficiente, chegando mesmo a divergir quando a aproximação inicial não era suficientemente boa por forma a que a aproximação (1.3) seja válida.

Por isso, utilizou-se um método de Gauss-Newton modificado usando para isso a rotina **E04GDF** da NAG.

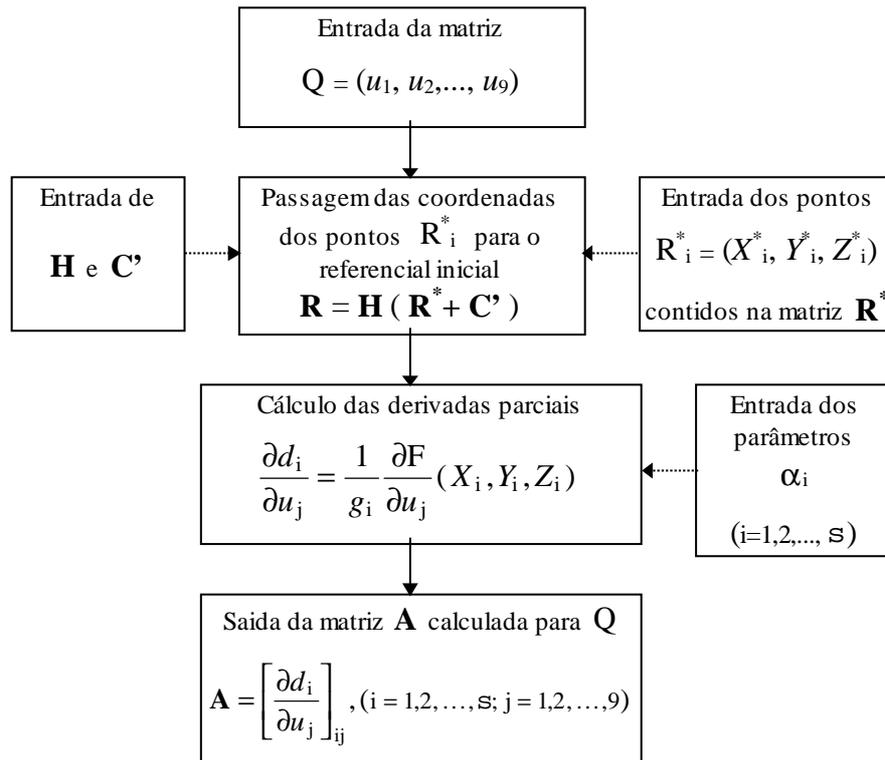


Figura 2.4 Esquema da rotina implementada para determinar a matriz \mathbf{A} .

Com os mesmos dados utilizados para o algoritmo anterior foram obtidos os mesmos valores para os parâmetros ajustados mas com um número muito inferior de iterações e de chamadas da função (ver quadro I).

Quadro I :

Comparação quanto ao número de chamadas da função E entre os 2 algoritmos.

Tipo de Quádrica	Nº de chamadas da função erro E	
	E04JAF	E04GDF
esfera	106	2
cilindro	152	2
cone	84	2
elipsóide	96	2
hiperbolóide de 1 folha	118	2

hiperbolóide de 2 folhas	124	3
parabolóide elíptico	427	7

2.5.5 Algoritmo numérico para minimizar a função erro não tendo em conta a sua forma particular de soma de quadrados

Como já foi afirmado, apesar da função E ser uma soma de quadrados, não há qualquer garantia à partida de os métodos de minimização mais específicos, que levam essa particularidade em linha de conta, sejam mais eficientes do que os métodos gerais de minimização. Tivemos também em conta esta questão, implementando um método mais geral para podermos comparar a sua eficiência com a do algoritmo do parágrafo anterior.

Para que essa comparação fosse fiável, utilizou-se um algoritmo que, tal como o método de Gauss-Newton, necessitasse apenas das derivadas de 1ª ordem. Para isso, seleccionou-se a rotina **E04DGF** da NAG que satisfaz essas condições e, além disso, permite ainda um controlo numérico no cálculo das derivadas.

Mantivemos com estimativa inicial para a solução aquela que já foi obtida atrás, pelo que bastou determinar a expressão do gradiente da função E para a referida rotina ser implementada.

O gradiente da função E será, por definição, dado por

$$\mathbf{g}_E := \left[\left(\frac{\partial E}{\partial u_1} \right) \quad \left(\frac{\partial E}{\partial u_2} \right) \quad \cdots \quad \left(\frac{\partial E}{\partial u_9} \right) \right]^T.$$

A partir da expressão de $E(Q)$ dada por

$$E(Q) = \sum_{i=1}^S d_i^2 = \sum_{i=1}^S (x_i - X_i)^2 + (y_i - Y_i)^2 + (z_i - Z_i)^2$$

e derivando em relação a u_j , obtém-se

$$\left(\frac{\partial E}{\partial u_j} \right) = 2 \sum_{i=1}^S \left[(X_i - x_i) \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + (Y_i - y_i) \left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + (Z_i - z_i) \left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) \right].$$

Considerando novamente a relação vectorial (2.10.2), na forma

$$\begin{cases} x_i - X_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \\ y_i - Y_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \\ z_i - Z_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \end{cases},$$

vem,

$$\left(\frac{\partial E}{\partial u_j} \right) = -2 \sum_{i=1}^S \alpha_i \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Y_i}{\partial u_j} \right) + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Z_i}{\partial u_j} \right) \right],$$

e finalmente, a partir de (2.21),

$$\boxed{\left(\frac{\partial E}{\partial u_j} \right) = 2 \sum_{i=1}^S \alpha_i \frac{\partial F}{\partial u_j}(X_i, Y_i, Z_i)}, \quad (j = 1, 2, \dots, 9).$$

Consequentemente, o gradiente de E será dado por

$$\mathbf{g}_E = 2 \left[\sum_{i=1}^S \alpha_i X_i^2 \quad \sum_{i=1}^S \alpha_i Y_i^2 \quad \sum_{i=1}^S \alpha_i Z_i^2 \quad 2 \sum_{i=1}^S \alpha_i X_i Y_i \quad 2 \sum_{i=1}^S \alpha_i X_i Z_i \quad 2 \sum_{i=1}^S \alpha_i Y_i Z_i \quad \sum_{i=1}^S \alpha_i X_i \quad \sum_{i=1}^S \alpha_i Y_i \quad \sum_{i=1}^S \alpha_i Z_i \right]^T.$$

Depois de termos confirmado, através da rotina **E04DGF**, que os valores para os parâmetros ajustados estavam de acordo com aqueles que já tinham sido determinados atrás (e que as derivadas eram bem calculadas através das expressões anteriores), adoptámos a rotina **E04KDF** para a minimização por ser mais adequada às dimensões do nosso problema.

Comparando os resultados obtidos através da rotina **E04KDF** com os que foram determinados atrás através da **E04GDF** (ver quadro II), verificamos que há um ligeiro aumento de eficiência neste último algoritmo, já que se nota alguma redução no número de chamadas da função; isso é mais notório nos casos mais instáveis como o do parabolóide elíptico que passou de 7 para 2.

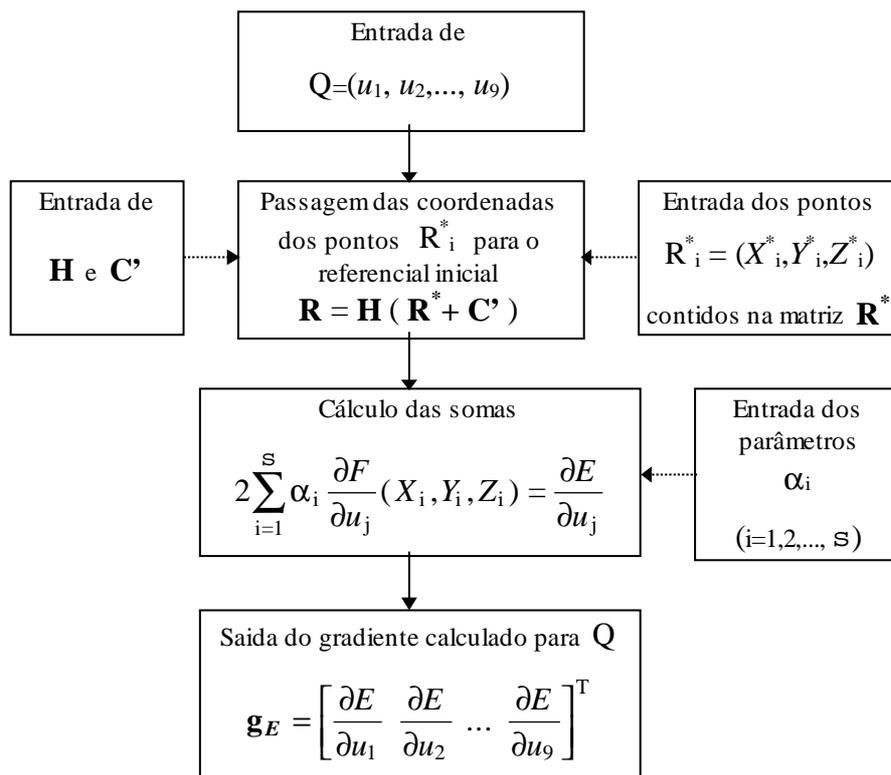


Figura 2.5 Esquema da rotina implementada para determinar o gradiente da função erro E .

Quadro II :

Comparação quanto ao número de chamadas da função entre os 3 algoritmos.

Tipo de Quádrica	Nº de chamadas da função erro E		
	E04JAF	E04GDF	E04KDF
esfera	106	2	2
cilindro	152	2	2
cone	84	2	2
elipsóide	96	2	2
hiperbolóide de 1 folha	118	2	2
hiperbolóide de 2 folhas	124	3	2
parabolóide elíptico	427	7	2

Capítulo 3

Propagação dos erros nas coordenadas aos parâmetros da quádrlica ajustada

3.1 Formulação do problema

As coordenadas a partir das quais é feito o ajustamento são obtidas através de um processo de medição. Consequentemente, essas coordenadas estarão afectadas de erros inerentes à medição.

Em condições normais, os erros sistemáticos são corrigidos durante a fase de aquisição de coordenadas. No entanto, os erros aleatórios não podem ser eliminados e irão propagar-se aos parâmetros da quádrlica durante o processo de ajustamento.

Portanto, é importante conhecer em que medida pequenas variações nas coordenadas dos pontos podem alterar os parâmetros da quádrlica ajustada.

Supondo então que os erros sistemáticos foram eliminados, será necessário agora um modelo que permita estudar a propagação dos erros aleatórios. Será pois este o objectivo do capítulo 3[†].

Este problema pode ser tratado através de um modelo probabilístico em que se associa o resultado de uma medição a uma *variável aleatória* contínua - ou a uma sequência ordenada de variáveis aleatórias contínuas que formam um *vector aleatório*.

A medição das 3 coordenadas x , y e z de um ponto situado sobre uma superfície pode ser considerada como uma experiência aleatória descrita por um *vector aleatório* (T_x, T_y, T_z) . Nestes casos costuma-se utilizar um modelo em que cada uma das 3 variáveis aleatórias, consideradas contínuas, obedece a uma *distribuição normal*, o que significa que o vector aleatório é *multinormal*.

Usando uma notação mais compacta, vamos começar então por associar aos observáveis, que aqui irão ser as coordenadas dos pontos

$$P := (p_1, p_2, \dots, p_{3s}) = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_s, y_s, z_s), \ddagger$$

[†] Salvo indicação em contrário, usaremos a mesma notação que nos capítulos 1 e 2.

as variáveis aleatórias normais $T = (T_1, T_2, \dots, T_{3s})$; designamos por

$$\Sigma_{PP} = \begin{bmatrix} \sigma_{p_1}^2 & \sigma_{p_1 p_2} & \cdots & \sigma_{p_1 p_{3s}} \\ \sigma_{p_2 p_1} & \sigma_{p_2}^2 & \cdots & \sigma_{p_2 p_{3s}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p_{3s} p_1} & \sigma_{p_{3s} p_2} & \cdots & \sigma_{p_{3s}}^2 \end{bmatrix}.$$

a matriz de covariância destas variáveis aleatórias.

Da mesma forma, para os parâmetros definidores da quádrlica $\bar{Q} = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_9)$, obtida por ajustamento aos referidos pontos e que iremos considerar como realização do vector aleatório $U = (U_1, U_2, \dots, U_9)$, vamos denominar a sua matriz de covariância por

$$\Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}} = \begin{bmatrix} \sigma_{\bar{u}_1}^2 & \sigma_{\bar{u}_1 \bar{u}_2} & \cdots & \sigma_{\bar{u}_1 \bar{u}_9} \\ \sigma_{\bar{u}_2 \bar{u}_1} & \sigma_{\bar{u}_2}^2 & \cdots & \sigma_{\bar{u}_2 \bar{u}_9} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{\bar{u}_9 \bar{u}_1} & \sigma_{\bar{u}_9 \bar{u}_2} & \cdots & \sigma_{\bar{u}_9}^2 \end{bmatrix}.$$

Supondo que existem relações funcionais lineares entre as variáveis aleatórias, isto é, relações da forma

$$U_j = m_{j1}T_1 + m_{j2}T_2 + \dots + m_{j3s}T_{3s} + n_j, \quad m_{ji}, n_j \in \mathbb{R}, \quad (i = 1, 2, \dots, 3s; j = 1, 2, \dots, 9),$$

ou, matricialmente

$$U = M T + N, \quad M := [m_{ij}]_{(i=1, 2, \dots, 3s; j=1, 2, \dots, 9)} \text{ e } N := [n_j]_{(j=1, 2, \dots, 9)}, \quad (3.1)$$

a relação entre as matrizes de covariância é dada por

$$\Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}} = M \Sigma_{PP} M^T. \quad (3.2)$$

Por conseguinte o primeiro passo a dar será tentar obter uma relação da forma (3.1) entre as variáveis aleatórias U e T . Para isso e com base na definição (2.11), mas permitindo agora que os pontos P_i , ($i=1, 2, \dots, s$), possam variar, começamos por considerar as funções desvio mais gerais

$$d_i : \mathbb{R}^9 \times \mathbb{R}^{3s} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (i=1, 2, \dots, s), \\ (Q, P) \mapsto d_i(Q, P)$$

[‡] Iremos usar $P = (p_1, p_2, \dots, p_{3s})$ para tornar a notação mais leve ou $P = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_s, y_s, z_s)$, para tornar a notação mais clara, consoante aquilo que nos parecer mais conveniente.

em que $Q=(u_1, u_2, \dots, u_9)$ determina uma quádrlica qualquer; e P é um elemento de R^{3s} que corresponde à matriz coluna $\mathbf{P} = [x_1 \ y_1 \ z_1 \ x_2 \ y_2 \ z_2 \ \dots \ x_s \ y_s \ z_s]^T$ cujos elementos são as coordenadas cartesianas de s pontos também variáveis ($s \geq 9$), $P_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$; e $d_i(Q,P)$, a distância algébrica do i -ésimo ponto P_i à quádrlica Q .

Representemos por $\mathbf{P}^0 = [x_1^0 \ y_1^0 \ z_1^0 \ x_2^0 \ y_2^0 \ z_2^0 \ \dots \ x_s^0 \ y_s^0 \ z_s^0]^T$ a matriz coluna que contém as coordenadas de s pontos obtidas por medição e, portanto, afectadas de erro, e por $\bar{Q}^0 = (\bar{u}_1^0, \bar{u}_2^0, \dots, \bar{u}_9^0)$ a quádrlica que melhor se ajusta a esses pontos.

Linearizando cada função d_i através do desenvolvimento em série de Taylor na vizinhança de $(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0)$, vem

$$\begin{aligned} d_i(Q,P) &\approx d_i(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + (u_1 - \bar{u}_1^0) \frac{\partial d_i}{\partial u_1}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + (u_2 - \bar{u}_2^0) \frac{\partial d_i}{\partial u_2}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + \dots \\ &\dots + (u_9 - \bar{u}_9^0) \frac{\partial d_i}{\partial u_9}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + (x_1 - x_1^0) \frac{\partial d_i}{\partial x_1}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + (y_1 - y_1^0) \frac{\partial d_i}{\partial y_1}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0) + \dots \\ &\dots + (z_s - z_s^0) \frac{\partial d_i}{\partial z_s}(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0), \quad (i=1, 2, \dots, s). \end{aligned}$$

Definindo as matrizes coluna

$$\mathbf{d}(Q,P) = [d_i(Q,P)]_{(i=1,2,\dots,s)} \quad ; \quad \mathbf{d}^0 = [d_i(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0)]_{(i=1,2,\dots,s)} \quad ; \quad (3.3)$$

$$\omega(Q,P) = \mathbf{d}(Q,P) - \mathbf{d}^0 \quad ; \quad \delta = \mathbf{Q} - \bar{Q}^0 \quad ; \quad \eta = \mathbf{P} - \mathbf{P}^0 \quad ;$$

e ainda as matrizes

$$\mathbf{A}^0 = \begin{bmatrix} \frac{\partial d_1}{\partial u_1} & \frac{\partial d_1}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_1}{\partial u_9} \\ \frac{\partial d_2}{\partial u_1} & \frac{\partial d_2}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_2}{\partial u_9} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial d_s}{\partial u_1} & \frac{\partial d_s}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial d_s}{\partial u_9} \end{bmatrix}_{(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0)} \quad \text{e} \quad \mathbf{B}^0 = \begin{bmatrix} \frac{\partial d_1}{\partial x_1} & \frac{\partial d_1}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial d_1}{\partial z_s} \\ \frac{\partial d_2}{\partial x_1} & \frac{\partial d_2}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial d_2}{\partial z_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial d_s}{\partial x_1} & \frac{\partial d_s}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial d_s}{\partial z_s} \end{bmatrix}_{(\bar{Q}^0, \mathbf{P}^0)} \quad , (3.4)$$

podem-se escrever as relações anteriores na forma matricial

$$\boxed{\omega(Q,P) \approx \mathbf{A}^0 \delta + \mathbf{B}^0 \eta} .$$

Considerando agora que para (Q,P) na vizinhança de (\bar{Q}^0, P^0) , $Q = (u_1, u_2, \dots, u_9)$ é a quádriga que melhor se ajusta aos pontos em P ; isso significa que Q é o minimizante da função erro E_P associada aos pontos em P :

$$E_P : \mathbb{R}^9 \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ Q \mapsto E_P(Q) = \sum_{i=1}^s d_i^2(Q, P)$$

Na forma matricial, $E_P(Q)$ pode ser dada por

$$E_P(Q) = [\mathbf{d}^0 + \omega(Q, P)]^T [\mathbf{d}^0 + \omega(Q, P)].$$

e, se Q corresponder ao mínimo local de E_P , então tem de satisfazer as 9 condições

$$\frac{\partial E_P}{\partial u_j}(Q) = 0 \quad ; \quad (j = 1, 2, \dots, 9),$$

isto é,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial u_j} \left\{ [\mathbf{d}^0 + \omega(Q, P)]^T [\mathbf{d}^0 + \omega(Q, P)] \right\} (Q, P) = \\ &= \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\mathbf{d}^{0T} \mathbf{d}^0 + 2\omega^T(Q, P) \mathbf{d}^0 + \omega^T(Q, P) \omega(Q, P) \right] = \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\omega^T(Q, P) \right] \mathbf{d}^0 + \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\omega^T(Q, P) \omega(Q, P) \right] \end{aligned}$$

Passando à notação algébrica para tornar mais claros os cálculos, pode-se escrever

$$2 \sum_{i=1}^s \left[\frac{\partial \omega_i}{\partial u_j}(Q, P) d_i(Q, P) \right] + \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\omega_i^2(Q, P) \right] = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, 9) \quad (3.6)$$

onde $\omega_i(Q, P)$, $(i=1, 2, \dots, s)$, representa o elemento na linha i da matriz coluna $\omega(Q, P)$.

Como,

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial u_j}(Q, P) = \frac{\partial}{\partial u_j} \left[d_i(Q, P) - d_i(\bar{Q}^0, P^0) \right] = \frac{\partial d_i}{\partial u_j}(Q, P)$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\omega_i^2(Q, P) \right] &= \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial u_j} \left\{ \left[d_i(Q, P) - d_i(\bar{Q}^0, P^0) \right]^2 \right\} = \\ &= 2 \sum_{i=1}^s \left[d_i(Q, P) - d_i(\bar{Q}^0, P^0) \right] \frac{\partial d_i}{\partial u_j}(Q, P) = \end{aligned}$$

$$= 2 \sum_{i=1}^S \omega_i(Q, P) \frac{\partial d_i}{\partial u_j}(Q, P),$$

substituindo em (3.6), vem

$$2 \sum_{i=1}^S \frac{\partial d_i}{\partial u_j}(Q, P) d_i(\bar{Q}^0, P^0) + 2 \sum_{i=1}^S \omega_i(Q, P) \frac{\partial d_i}{\partial u_j}(Q, P) = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, 9).$$

Voltando à notação matricial, podem-se escrever as equações anteriores na forma

$$[\mathbf{A}]^T (\mathbf{d}^0 + \omega) = \mathbf{0}, \quad (3.7)$$

onde \mathbf{A} representa a matriz correspondente a \mathbf{A}^0 mas agora com as derivadas calculadas em (Q, P) , tal como $\omega = \omega(Q, P)$.

Recordando que (Q, P) pertence à vizinhança de (\bar{Q}^0, P^0) , ter-se-á, a partir de (3.5)

$$\omega \approx \mathbf{A}^0 \delta + \mathbf{B}^0 \eta,$$

sendo $\eta = \mathbf{P} - \mathbf{P}^0$ e $\delta = \mathbf{Q} - \bar{\mathbf{Q}}^0$ as matrizes-coluna que contêm respectivamente os incrementos nas coordenadas e as respectivas variações nos parâmetros da quádrlica ajustada aos pontos.

Substituindo em (3.7), obtém-se então

$$[\mathbf{A}]^T (\mathbf{d}^0 + \mathbf{A}^0 \delta + \mathbf{B}^0 \eta) \approx \mathbf{0}.$$

No entanto, para o efeito da propagação dos erros, pode-se tomar a aproximação

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{A}^0,$$

de onde resulta

$$[\mathbf{A}^0]^T \mathbf{d}^0 + [\mathbf{A}^0]^T \mathbf{A}^0 \delta + [\mathbf{A}^0]^T \mathbf{B}^0 \eta \approx \mathbf{0}.$$

Atendendo a que, por (1.2), o gradiente em (\bar{Q}^0, P^0) da função E_{P^0} (análoga a E_P) é dado por $2\mathbf{A}^{0T} \mathbf{d}^0$ e como \bar{Q}^0 é minimizante dessa função, vem

$$\mathbf{A}^{0T} \mathbf{d}^0 = \mathbf{0}.$$

Então finalmente pode-se escrever

$$\boxed{\delta \approx \mathbf{L}^0 \eta, \text{ com } \mathbf{L}^0 = -(\mathbf{A}^{0T} \mathbf{A}^0)^{-1} \mathbf{A}^{0T} \mathbf{B}^0}, \quad (3.8)$$

o que nos dá uma relação linear aproximada entre os incrementos nas coordenadas dos pontos P_i , ($i=1, 2, \dots, s$), e as consequentes variações nos parâmetros da quádrlica ajustada a esses pontos, através da matriz L^0 de dimensões $9 \times 3s$.

3.2 Determinação das matrizes **A** e **B** das derivadas parciais

A matriz **A** das derivadas de d_i em ordem a u_j já foi determinada no parágrafo (2.5.4). Falta então determinar as derivadas de d_i em ordem às coordenadas x_k , y_k , z_k , ($i, k = 1, 2, \dots, s$).

Como na função

$$d_i : \mathbb{R}^9 \times \mathbb{R}^{3s} \rightarrow \mathbb{R} \\ (Q, P) \mapsto d_i(Q, P) \quad ,$$

$d_i(Q, P)$ representa a distância algébrica do i -ésimo ponto P_i à quádrlica Q , uma vez fixada a quádrlica Q , $d_i(Q, P)$ depende apenas do ponto P_i , logo, para $i, k = 1, 2, \dots, s$,

$$\boxed{\frac{\partial d_i}{\partial x_k} = \frac{\partial d_i}{\partial y_k} = \frac{\partial d_i}{\partial z_k} = 0, \quad \text{se } i \neq k} .$$

Resta então apenas a determinação das expressões das derivadas

$$\frac{\partial d_i}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial d_i}{\partial y_i} \quad \text{e} \quad \frac{\partial d_i}{\partial z_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, s).$$

Considerando uma quádrlica de equação $F(X, Y, Z) = 0$ arbitrariamente fixada, como

$$d_i(Q, P) = \alpha_i g_i ,$$

com

$$g_i = \alpha_i \left\| \vec{\text{grad}} F(X_i, Y_i, Z_i) \right\| = \\ = \alpha_i \sqrt{\left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2 + \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2 + \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right]^2} ,$$

vem

$$\frac{\partial d_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} g_i + \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i}, \quad (3.9)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial x_i} = \frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Considerando de novo a relação vectorial (2.10.2) na forma

$$\begin{cases} x_i - X_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \\ y_i - Y_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i), \\ z_i - Z_i = \alpha_i \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \end{cases}$$

e derivando em ordem a x_i ambos os membros de cada uma destas 3 igualdades, obtém-se

$$\begin{cases} \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] = -\left(\frac{\partial X_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) + 1 \\ \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] = -\left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \\ \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] = -\left(\frac{\partial Z_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \end{cases} \quad (3.11)$$

Assim, de (3.10), vem

$$\begin{aligned} \alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i} = \frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \right\}, \end{aligned}$$

e de (3.8),

$$\begin{aligned}
\alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i} &= \frac{1}{g_i} \left\{ \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial X_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) + 1 \right] + \right. \\
&\quad + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \right] + \\
&\quad \left. + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left[\left(\frac{\partial Z_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \right] \right\}, \\
\alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i} &= -\frac{1}{g_i} \left[\frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial X_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i) \left(\frac{\partial Z_i}{\partial x_i} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} g_i^2 - \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i) \right], \quad (i=1, 2, \dots, s). \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Mas como $\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_i} \right) = 0$, porque a quádrlica não depende de P_i , logo

$$\frac{\partial F_i}{\partial X_i} \left(\frac{\partial X_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial F_i}{\partial Y_i} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial F_i}{\partial Z_i} \left(\frac{\partial Z_i}{\partial x_i} \right) = 0$$

e substituindo na expressão (3.12), vem então

$$\alpha_i \frac{\partial g_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial \alpha_i}{\partial x_i} g_i + \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i),$$

de onde finalmente, a partir de (3.9) se obtém

$$\frac{\partial d_i}{\partial x_i} = \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i), \quad (i=1, 2, \dots, s).$$

As derivadas de d_i em ordem a y_i e z_i obtêm-se de forma análoga.

Portanto, teremos então

$$\begin{aligned} \frac{\partial d_i}{\partial x_i} &= \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial X}(X_i, Y_i, Z_i), \\ \frac{\partial d_i}{\partial y_i} &= \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial Y}(X_i, Y_i, Z_i), \\ \frac{\partial d_i}{\partial z_i} &= \frac{1}{g_i} \frac{\partial F}{\partial Z}(X_i, Y_i, Z_i). \end{aligned}$$

Portanto, a matriz **B** será dada por

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{F_{X,1}}{g_1} & \frac{F_{Y,1}}{g_1} & \frac{F_{Z,1}}{g_1} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{F_{X,2}}{g_2} & \frac{F_{Y,2}}{g_2} & \frac{F_{Z,2}}{g_2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{F_{X,s}}{g_s} & \frac{F_{Y,s}}{g_s} & \frac{F_{Z,s}}{g_s} \end{bmatrix},$$

em que

$$F_{X,k} = \frac{\partial F}{\partial X}(X_k, Y_k, Z_k), \quad F_{Y,k} = \frac{\partial F}{\partial Y}(X_k, Y_k, Z_k), \quad F_{Z,k} = \frac{\partial F}{\partial Z}(X_k, Y_k, Z_k), \quad (k=1, 2, \dots, s).$$

No nosso problema, os elementos das matrizes **A** e **B** são calculados em (\bar{Q}^0, P^0) , isto é, usando as coordenadas medidas dos pontos e os parâmetros da quádrlica resultante do ajustamento, a esses pontos, pelo método dos Mínimos Quadrados.

3.3 Determinação da matriz de covariância dos parâmetros ajustados e dos respectivos semi-eixos do elipsóide de confiança

Os acréscimos definidos por $H = T - P^0$ e $\Delta = U - \bar{Q}^0$, associados respectivamente aos acréscimos η e δ , considerados anteriormente, são vectores aleatórios com a mesma dispersão de T e U , respectivamente, logo as suas matrizes de covariância coincidem, isto é,

$$\Sigma_{\eta\eta} = \Sigma_{PP} \quad \text{e} \quad \Sigma_{\delta\delta} = \Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}} \quad (3.14)$$

Usando (3.2) e (3.8), estamos então agora em condições de determinar a matriz de covariância $\Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}}$ do vector aleatório U a partir da relação

$$\Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}} = \Sigma_{\delta\delta} = \mathbf{L}^0 \Sigma_{\eta\eta} [\mathbf{L}^0]^T. \quad (3.15)$$

Como em Metrologia se adopta a hipótese de que as variáveis aleatórias T_1, T_2, \dots, T_{3s} (associadas às coordenadas dos pontos) são independentes, elas são não correlacionadas dado serem normais. Por conseguinte, considerando que o desvio-padrão dos observáveis é um valor comum σ , a matriz de covariância é diagonal, quer dizer,

$$\Sigma_{\eta\eta} = \begin{bmatrix} \sigma^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma^2 \end{bmatrix} = \sigma^2 \mathbf{I}_{3s},$$

em que \mathbf{I}_{3s} representa a matriz identidade de ordem $3s$.

Da relação (3.15) tira-se então a igualdade

$$\Sigma_{\bar{Q}\bar{Q}} = \Sigma_{\delta\delta} = \sigma^2 \mathbf{L}^0 \mathbf{I}_{3s} [\mathbf{L}^0]^T = \sigma^2 \mathbf{L}^0 [\mathbf{L}^0]^T, \quad (3.16)$$

que permite determinar a matriz de covariância para os parâmetros definidores da quádrlica ajustada a partir da matriz \mathbf{L}^0 e do desvio-padrão das coordenadas, supostamente igual para todas.

A matriz de covariância $\Sigma_{\delta\delta}$ vai permitir obter uma *região de confiança* para os parâmetros da quádrlica, como veremos de seguida.

Atendendo à relação entre \mathbf{T} e \mathbf{U} , e como estamos a considerar uma distribuição multinormal para \mathbf{T} , também \mathbf{U} será multinormal. A densidade de um vector aleatório multinormal $\mathbf{V} = (V_1, V_2, \dots, V_9)$ qualquer é dada por

$$f(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{9}{2}} \sqrt{\det(\Sigma)}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu})\right].$$

em que $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^9$, Σ é a matriz de covariância de \mathbf{V} e $\boldsymbol{\mu}$ o respectivo vector das médias. Como esta matriz covariante é simétrica e positiva definida, o mesmo acontece à sua inversa Σ^{-1} , logo todos os valores próprios desta são reais positivos. Assim, para um valor real k arbitrário, a equação

$$(\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}) = k^2 \quad (3.17)$$

representa um elipsóide no espaço \mathbb{R}^9 , com centro em $\boldsymbol{\mu}$. Sobre este elipsóide a função densidade tem o valor constante

$$f(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{9}{2}} \sqrt{\det(\Sigma)}} \exp\left[-\frac{1}{2}k^2\right],$$

daí se dar a este a designação de *elipsóide de densidade constante*.

Tal como em \mathbb{R}^3 , para obter os semi-eixos deste elipsóide começam-se por determinar os valores próprios de Σ^{-1} que são iguais aos inversos dos da matriz Σ . Os eixos de simetria do elipsóide são determinados, aqui também, à custa dos vectores próprios de Σ^{-1} . Efectuando a mudança de referencial através da rotação

$$\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{v},$$

cujas 9 colunas da sua matriz \mathbf{H} associada são constituídas pelos vectores próprios normalizados de Σ^{-1} , obtém-se, no novo referencial de \mathbb{R}^n cujos eixos coordenados são paralelos aos eixos de simetria do elipsóide, a equação (3.17) simplificada (reduzida aos eixos)

$$(\bar{\mathbf{v}} - \boldsymbol{\mu})^T \begin{bmatrix} \lambda_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_9^{-1} \end{bmatrix} (\bar{\mathbf{v}} - \boldsymbol{\mu}) = k^2,$$

em que $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_9$, são os valores próprios da matriz Σ . Designando por $\bar{\mathbf{V}}$ o vector aleatório associado à variável transformada $\bar{\mathbf{v}}$, a sua matriz de covariância é

$$\Sigma_{\bar{\mathbf{v}\bar{\mathbf{v}}}} := \begin{bmatrix} \sigma_{\bar{v}_1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{\bar{v}_2}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{\bar{v}_9}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_9 \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

logo, os semi-eixos do elipsóide de confiança, que designaremos por a_i , ($i = 1, 2, \dots, 9$), são dados por

$$a_i^2 = k^2 \lambda_i, \quad (i = 1, 2, \dots, 9),$$

isto é,

$$a_i = |k| \sqrt{\lambda_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, 9). \quad (3.19)$$

A probabilidade de uma realização do vector aleatório \mathbf{V} cair dentro da região de confiança delimitada por este elipsóide é dada por

$$P[(\mathbf{V} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{V} - \boldsymbol{\mu}) < k^2],$$

ou, usando as variáveis transformadas, essa probabilidade também pode ser dada por

$$P[(\bar{\mathbf{V}} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\bar{\mathbf{V}} - \boldsymbol{\mu}) < k^2] = P\left[\frac{(\bar{V}_1 - \mu_1)^2}{\lambda_1} + \frac{(\bar{V}_2 - \mu_2)^2}{\lambda_2} + \dots + \frac{\bar{V}_9(\bar{t}_9 - \mu_9)^2}{\lambda_9} < k^2 \right] =$$

$$= \mathbb{P} \left[\frac{(\bar{V}_1 - \mu_1)^2}{\sigma_{\bar{v}_1}^2} + \frac{(\bar{V}_2 - \mu_2)^2}{\sigma_{\bar{v}_2}^2} + \dots + \frac{(\bar{V}_9 - \mu_9)^2}{\sigma_{\bar{v}_9}^2} < k^2 \right].$$

Como as variáveis aleatórias $\frac{(\bar{V}_i - \mu_i)^2}{\sigma_{\bar{v}_i}^2}$, ($i = 1, 2, \dots, 9$), são normais, de média nula e desvio-padrão unitário, a sua soma obedece à lei do qui-quadrado, isto é,

$$\chi_9^2 = \frac{(\bar{V}_1 - \mu_1)^2}{\sigma_{\bar{v}_1}^2} + \frac{(\bar{V}_2 - \mu_2)^2}{\sigma_{\bar{v}_2}^2} + \dots + \frac{(\bar{V}_9 - \mu_9)^2}{\sigma_{\bar{v}_9}^2},$$

obtendo-se então finalmente a igualdade

$$\mathbb{P}[(\bar{\mathbf{V}} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\bar{\mathbf{V}} - \boldsymbol{\mu}) < k^2] = \mathbb{P}[\chi_9^2 < k^2],$$

que permite calcular k a partir da probabilidade ou o recíproco, através da consulta de uma tabela do χ^2 ; por exemplo para uma probabilidade de 0.95, vem $k = 4.11$.

Finalmente as relações (3.19) permitem calcular os semi-eixos do elipsóide de confiança, a partir dos valores próprios da matriz de covariância.

No nosso caso concreto, em que $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{Q}}^0$ e $\mathbf{V} = \mathbf{U}$, e atendendo a que, como já vimos,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\bar{\mathbf{Q}}\bar{\mathbf{Q}}} = \boldsymbol{\Sigma}_{\delta\delta} = \sigma^2 \mathbf{L}^0 [\mathbf{L}^0]^T,$$

se designarmos por $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_9$, os valores próprios da matriz de ordem 9 $\mathbf{L}^0 [\mathbf{L}^0]^T$ que não dependem da precisão das coordenadas nem do método numérico de minimização usado, e atendendo às relações (3.18) e (3.19), os semi-eixos do elipsóide de confiança podem ser dados por

$$\boxed{a_i = k \sigma \sqrt{\Lambda_i}}, \quad (i = 1, 2, \dots, 9).$$

Apresentamos seguidamente, no quadro III, os valores dos semi-eixos obtidos em relação à propagação dos erros para os elementos geométricos ajustados atrás, considerando um grau de confiança de 95% ($k = 4.11$) e um desvio-padrão para as

coordenadas de $\sigma = 0.0010$:

Quadro II :

Semi-eixos dos elipsóides de confiança a 95%.

	Cilindro de revolução	Cone de revolução	Elipsóide	Hiperbolóide de 1 folha	Hiperbolóide de 2 folhas	Parabolóide elíptico	
	0.0055	0.0005	0.0073	0.0432	0.0660	0.0167	0.0017
	0.0056	0.0011	0.0089	0.0522	0.0720	0.0264	0.0052
	0.0077	0.0020	0.0093	0.0932	0.0992	0.0424	0.0064
	0.0079	0.0052	0.0142	0.0950	0.1413	0.1481	0.0078
	0.0080	0.0062	0.0215	0.1905	0.1659	0.1683	0.0154
	0.0292	0.0222	0.0236	0.2559	0.3942	0.2038	0.0700
	0.0781	0.0285	0.1205	0.3220	0.4046	0.5113	0.0908
	0.0799	0.0690	0.1274	0.3648	0.5397	0.5723	0.1363
	0.1897	0.1579	0.1403	0.7099	0.6273	0.8717	0.4003
Médias	0.0457	0.0325	0.0526	0.2363	0.2789	0.2846	0.0815

Como se pode ver, apesar de haver alguns semi-eixos cuja grandeza, em termos absolutos, parece ser demasiado grande, existe uma certa concordância entre os valores para os vários elementos testados.

Capítulo 4

Os desvios de forma

(uma aplicação do ajustamento de quádricas)

4.1 Preliminares

Após a execução do ajustamento, é importante saber em que medida é que os pontos medidos se aproximam ou afastam do elemento geométrico ajustado. A primeira ideia seria analisar os resíduos de cada um dos pontos depois do ajustamento concluído. No entanto, para se poder fazer uma comparação com os resultados de outros ajustamentos, convém condensar a informação no número mínimo de parâmetros possível, designados por *Desvios de Forma*, que dêem uma ideia global da medida em que o elemento se ajusta aos pontos. Para isso, existem já definidos dois desvios de forma :

- Um deles resulta directamente do processo de ajustamento e chama-se *Desvio Médio Quadrático*, sendo definido por

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^s d_i^2}{s-n}} = \sqrt{\frac{E(\bar{Q})}{s-n}},$$

em que s é o número de pontos usados no ajustamento, n é o número mínimo de pontos que permitem definir o elemento geométrico em causa e $E(\bar{Q})$ é o valor da função erro E calculado para a quádrica ajustada \bar{Q} . O valor de S é expresso nas mesmas unidades que d_i que, em Metrologia, é normalmente o milímetro.

- O outro, que se costuma designar por *Desvio por Amplitude*, é calculado com base nos desvios máximos dos pontos. É a distância entre dois elementos geométricos da mesma família do elemento geométrico ajustado, concêntricos ou paralelos a ele, que passam respectivamente pelos dois pontos mais afastados, por forma a limitarem uma região do espaço onde se encontram todos os pontos medidos (ver figura(4.1)). Este conceito de desvio de forma é bastante utilizado em normas fixadas para a metrologia, nomeadamente

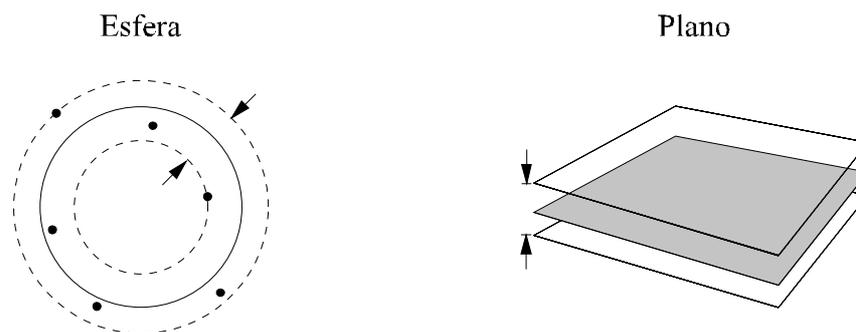


Figura 4.1 Desvio de forma por Amplitude.

nas normas internacionais ISO . Também neste caso a unidade utilizada é normalmente o milímetro.

Ambos os desvios de forma referidos são grandezas absolutas, expressas em unidades. Assim, o seu valor não permite uma avaliação imediata da qualidade geométrica da forma da peça sob teste, se as dimensões dessa peça não forem conhecidas. Por exemplo, não se pode dizer que o Desvio Médio Quadrático ou o Desvio por Amplitude de uma pretensa esfera é pequeno sem conhecer a ordem de grandeza do seu diâmetro. Portanto, haverá vantagem em se usarem desvios de forma expressos em termos relativos (adimensionais).

Outro problema que se põe quanto à definição do Desvio por Amplitude tem a ver com o facto de se tratar de um desvio local, isto é, dependente apenas dos 2 pontos com maior desvio e não da totalidade dos pontos medidos, o que não reflecte de forma global o defeito de forma.

As definições de desvios de forma que vamos propor de seguida vão ter em conta os aspectos referidos.

4.2 Definição de desvios de forma a partir do ajustamento de quádricas

Utilizámos o ajustamento de quádricas para definir outros desvios de forma para as figuras geométricas que ocorrem com frequência em Metrologia Geométrica : o plano, a esfera, o cilindro de revolução e o cone de revolução.

Antes de apresentarmos as suas definições, vamos enunciar os princípios que serviram de base à sua concepção, tendo em conta as razões já salientadas no parágrafo anterior.

Pretendemos que os desvios de forma sejam

1. iguais a zero quando se trata de uma forma perfeita,
2. grandezas relativas (adimensionais),
3. invariantes em relação à equação $F(X, Y, Z) = 0$ que representa o elemento geométrico em causa e que está directamente relacionada com o referencial usado,
4. tão globais quanto possível.

O primeiro princípio é assegurado desde que se escolham valores residuais que, nos casos ideais, sejam nulos.

Para obedecer ao princípio 2, há que dividir o resíduo por um valor da mesma natureza do parâmetro envolvido e que reflecta também a dimensão do elemento geométrico em causa.

Em relação ao princípio da invariância, vamos tentar usar, sempre que possível, valores intrínsecos ao próprio elemento (ligados portanto à sua forma), que não dependam da posição que ele ocupa no espaço.

O princípio da globalidade é naturalmente satisfeito quando se usa, no ajustamento das quádricas, um conjunto de pontos suficientemente representativo da forma geométrica sob teste.

Com base nestes princípios, propomos novas definições para desvios de forma usando, nesse sentido, o ajustamento de quádricas tratado no capítulo 2.

Vamos começar por ampliar a tabela 2.1 do capítulo 2, considerando agora todas as quádricas que possam definir superfícies com interesse para este problema dos desvios de forma (ver tabela 4.1).

No entanto, como já foi visto, todas as quádricas que resultam de um ajustamento são elipsóides ou hiperbolóides. As restantes quádricas nunca ocorrem na prática - são simples singularidades. Por exemplo em vez de um cone, vamos ter, por aparecer sempre um pequeno resíduo em D^* , hiperbolóide de 1 ou 2 folhas, consoante o dito resíduo seja positivo ou negativo, respectivamente. O mesmo acontece nos outros casos em que seria de esperar algum valor próprio ou D^* nulos, como vai haver sempre um resíduo vamos sempre cair no caso de um elipsóide ou um hiperbolóide.

Tabela 4.1[†]

Centro	λ	μ	ν	D^*	Tipo de quádrlica
um	> 0	> 0	> 0	> 0	elipsóide
um	> 0	> 0	< 0	> 0	hiperbolóide de 1 folha
um	> 0	< 0	< 0	> 0	hiperbolóide de 2 folhas
um	> 0	> 0	< 0	$= 0$	cone
não	> 0	> 0	$= 0$	$= 0$	parabolóide elíptico
não	> 0	< 0	$= 0$	$= 0$	parabolóide hiperbólico
recta	> 0	> 0	$= 0$	> 0	cilindro elíptico
recta	> 0	< 0	$= 0$	> 0	cilindro hiperbólico
não	> 0	$= 0$	$= 0$	$= 0$	cilindro parabólico

Nos casos em que se espera que λ , ou outro valor próprio, seja nulo poderíamos definir o defeito de forma, que designaremos por f_λ , como sendo

$$f_\lambda = \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2}},$$

onde λ é o resíduo obtido para a quádrlica ajustada e o denominador se destina à normalização e a tornar o desvio invariante com respeito ao referencial.

Nos casos em que se espera que D^* seja nulo, podemos definir de forma análoga o defeito de forma, que designaremos por f_D , como sendo

$$f_D = \frac{D^*}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2}},$$

onde D^* representa o resíduo obtido.

Em relação ao desvio das formas de revolução (de secções circulares) para formas com secções elípticas vamos usar a excentricidade

$$e = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} = \sqrt{1 - \frac{\lambda}{\mu}},$$

sendo a o maior e b o menor dos semi-eixos da secção elíptica e λ e μ os respectivos valores próprios.

Portanto, para o plano, a esfera, o cilindro de revolução e para o cone de revolução, vamos propor os seguintes desvios de forma :

Plano :

Dado que o plano é uma superfície muito simples, quando se ajusta uma quádriga a um conjunto de pontos representativos de um plano, o resultado pode ser quer um elipsóide quer um hiperbolóide de 1 ou 2 folhas.

Porém, o nosso algoritmo de ajustamento revelou-se numericamente instável para este caso; para todos os conjuntos de pontos representativos de planos que usámos obtivemos valores extremamente elevados para os semi-eixos dos elipsóides de confiança.

Esfera :

Quando se ajusta uma quádriga a um conjunto de pontos representativos de uma esfera obtém-se, como seria de esperar, um elipsóide em que os 3 semi-eixos têm comprimentos quase iguais entre si. O desvio da forma esférica deverá então reflectir a diferença entre esses semi-eixos, o que poderá ser feito através das 3 excentricidades que se podem calcular combinando esses semi-eixos dois a dois. O desvio de forma esférica poderia assim ser dado pela excentricidade máxima, que designaremos por e_{\max} .

No caso dos valores da tabela I , obtém-se $e_{\max} = 0.0228$.

Cilindro de revolução :

[†] Para sistematizar esta classificação considerou-se que λ e D^* são sempre não negativos, o que se pode

O cilindro de revolução tende para um elipsóide alongado ou para um hiperbolóide de 1 folha, consoante o valor próprio residual seja positivo ou negativo, respectivamente.

Em ambos os casos, o desvio em relação à forma circular (de revolução) pode ser dado pela excentricidade da secção elíptica (no caso do elipsóide usam-se os 2 semi-eixos mais pequenos).

Para se quantificar a degeneração das rectas geratrizes em elipses ou parábolas pode usar-se a quantidade

$$f_v = \frac{v}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2 + v^2}},$$

em que se supõe que v é o valor próprio que se deveria anular.

No caso dos valores da tabela II , obtém-se $e = 0.0124$ e $f_v = 0.000046$.

Cone de revolução :

Como já foi referido, neste caso vamos obter um hiperbolóide de 1 ou 2 folhas consoante o valor residual de D^* seja positivo ou negativo, respectivamente.

Tal como no cilindro, o desvio em relação à forma circular (de revolução) pode ser dado pela excentricidade da secção elíptica.

Quanto à quantificação da degeneração das rectas geratrizes em hiperboles pode usar-se a quantidade também já referida

$$f_D = \frac{D^*}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2 + v^2}}.$$

No caso dos valores da tabela III , obtém-se $e = 0.0290$ e $f_D = 0.1605$.

obter multiplicando, se necessário, ambos os membros da equação da quádrlica por (-1) e efectuando uma conveniente ordenação dos valores próprios.

Conclusões finais

Como foi dito no início, o objectivo deste trabalho era a construção de algoritmos para o ajustamento de quádricas pelo critério dos mínimos quadrados, no contexto da Metrologia Geométrica.

Nesse sentido, a concordância entre os resultados teóricos e os valores numéricos obtidos permitem-nos acreditar que esse objectivo foi atingido.

Em relação ao estudo sobre a propagação dos erros, os resultados numéricos encontrados não foram totalmente satisfatórios, especialmente no caso dos valores obtidos para os semi-eixos dos elipsóides de confiança; possivelmente, isso deve-se mais ao facto do modelo usado para a propagação dos erros não ser o mais adequado do que à própria instabilidade dos algoritmos de ajustamento.

Finalmente, em relação à proposta de novos desvios de forma, pensamos ter contribuído para dar outras perspectivas em relação a esse assunto, no sentido de cada parâmetro de desvio conter o máximo de informação sobre a forma das peças sob teste.

Quanto a futuros desenvolvimentos deste problema, para além de um estudo mais extenso e aprofundado dos erros inerentes a estes algoritmos, há ainda a resolver o problema da *correção do palpador* (ver [1], pg 169) para o caso das quádricas quando se usa uma CMM na aquisição das coordenadas.

Outro importante problema a estudar será o desenvolvimento de algoritmos mais globais que permitam descrever superfícies através da junção de secções de quádricas de vários tipos, tendo em especial atenção as linhas de união dessas secções.

BIBLIOGRAFIA

- [1]Alves, A.S. - *Metrologia Geométrica-* , Coimbra, 1994;
- [2]Forbes, A.B. - *Least-squares best-fit geometric elements* - NPL report DICT 140/89, edição revista, National Physical Laboratory, Teddington, 1991;
- [3]Gill. P. E. ; Murray, W. e Wright, M. H. - *Practical Optimization* - Academic Press, E. U. A., 1991
- [4]Gonçalves, G.R. - *Orientação Relativa de Dois Teodolitos* - Coimbra, 1994
- [5]Lotze, W. - *Generalized Fitting Algorithms in the Coordinate Measuring Techniques in Quality Control* - Technische Universität Dresden
- [6]Nash, J.C. - *Compact Numerical Methods for computers - Linear Algebra and Function Minimization* - Adam Hilger, 1979
- [7]NAG - *Fortran Library Manual* - NAG Ltd, 1991
- [8]Neumann, H.J. - *Coordinate Metrology, Technology and Application* - Verlag Modern Industrie, 1990
- [9]Oliveira Martins, M. T. F. - *Complementos de Geometria* - Apontamentos das aulas teóricas, Coimbra, 1984
- [10] Santos-Loff, D. M. - *Central Quadric Surfaces Best Fitting by Least Squares* - Coimbra, 1993

- [11] Trapet, E. e Wäldele, F. - *Aseguramiento de la Culidad para Máquinas de Medir por Coordenadas* - Physikalisch Technisch Bundesanstalt, 1991
- [12] Wright, S e Moré, J.J. - *Numerical Optimization algorithms and software* -SIAM TUTORIAL course notes, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, 1992

BIBLIOGRAFIA

- [1] Alves, A.S. - *Metrologia Geométrica* - , Coimbra, 1994;
- [2] Forbes, A.B. - *Least-squares best-fit geometric elements* - NPL report DICT 140/89, edição revista, National Physical Laboratory, Teddington, 1991;
- [3] Gill. P. E. ; Murray, W. e Wright, M. H. - *Practical Optimization* - Academic Press, E. U. A., 1991
- [4] Gonçalves, G.R. - *Orientação Relativa de Dois Teodolitos* - Coimbra, 1994
- [5] Lotze, W. - *Generalized Fitting Algorithms in the Coordinate Measuring Techniques in Quality Control* - Technische Universität Dresden
- [6] Nash, J.C. - *Compact Numerical Methods for computers - Linear Algebra and Function Minimization* - Adam Hilger, 1979
- [7] NAG - *Fortran Library Manual* - NAG Ltd, 1991
- [8] Neumann, H.J. - *Coordinate Metrology, Technology and Application* - Verlag Modern Industrie, 1990
- [9] Oliveira Martins, M. T. F. - *Complementos de Geometria* - Apontamentos das aulas teóricas, Coimbra, 1984

- [10] Santos-Loff, D. M. - *Central Quadric Surfaces Best Fitting by Least Squares* - Coimbra, 1993
- [11] Trapet, E. e Wäldele, F. - *Aseguramiento de la Calidad para Máquinas de Medir por Coordenadas* - Physikalisch Technisch Bundesanstalt, 1991
- [12] Wright, S e Moré, J.J. - *Numerical Optimization algorithms and software* - SIAM TUTORIAL course notes, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, 1992