Método dos Mínimos quadrados:

Regressão Linear

Introdução: O objetivo deste método é obter uma função que se aproxime de um conjunto de pontos dados ou de outra função dada. Esse tipo de procedimento se faz necessário quando os pontos dados devem sofrer um processo de interpolação ou seu comportamento deve ser usado em outros cálculos.

- Muitas vezes o uso de uma função complexa, com cálculo lento e complicado, pode ser evitado se for utilizada uma outra função que possa substituí-la, dentro de uma determinada margem de erro, em um determinado trecho.

Essas aplicações fazem com que sejam buscados métodos de "criação de funções" especiais que, apesar de mais simples e com um comportamento mais adequado a cada caso, substituem os pontos originais

- O primeiro desses métodos, o Método dos mínimos quadrados, é o mais utilizado, por ter uma abordagem simples, ser preciso, e seu resultado pode abranger várias famílias de funções, principalmente os ~~po~~ polinômios.

- Método dos mínimos quadrados

- O objetivo desse método é encontrar uma função g(x) que mais se aproxime de outra função f(x). Essa substituição pode ser necessário se:

⇒ A função f(x) descreve um fenômeno real, e deseja-se encontrar uma outra função g(x), que melhore a aproximação, mas ainda represente o comportamento do fenômeno.

⇒ Tem-se uma função f(x), mas há a necessidade de outra função, g(x), que facilite o modelamento do processo.

A aproximação é feita da seguinte maneira:

- Sejam $f(x)$ a função original, $g(x)$ a função que irá aproximar $f(x)$, e $r(x)$ a função erro, que exprime as diferenças entre $f(x)$ e $g(x)$. Assim:

$$r(x) = f(x) - g(x)$$

Idealmente, a melhor aproximação será aquela em que $r(x) = 0$, ou, como na maioria dos casos de aplicação desse método,

$$\min \left[\sum_x r(x) \right] \qquad (I)$$

Suponhamos que um experimento levantou os pontos P_1, P_2, P_3 e P_4.

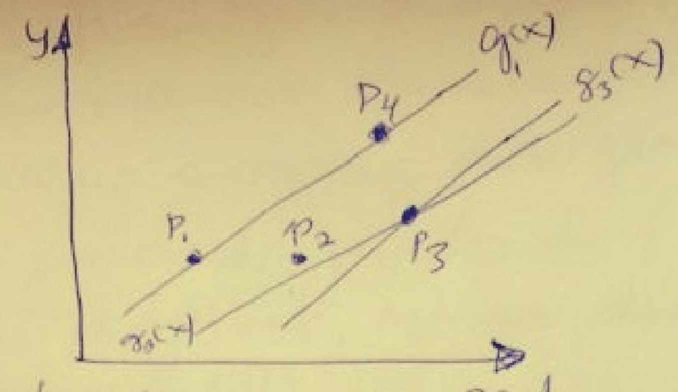
Suponhamos também que seja conhecido que o comportamento do fenômeno seja descrito por uma reta. O objetivo do método é, portanto, obter $g(x)$ tal que se comporte como uma reta, e que se aproxime ao máximo de $f(x) = P_x = P_x = \{P_1, P_2, P_3, P_4\}$.

— Se aplicarmos a expressão (I), como alguns erros serão positivos e outros negativos, poderemos ter uma expressão errada das retas escolhidas, e talvez a pior reta seja aquela que apresente o menor valor de $R(x)$.

— Temos, portanto, que desconsiderar os sinais dos erros. O uso do valor absoluto dos erros, $|r(x)|$, não é conveniente, pois a função módulo apresenta um comportamento difícil de trabalhar, principalmente na região em que $|x|$ está próximo de zero. Uma boa escolha é elevar o erro ao quadrado. Assim, o novo critério para reduzir o erro será:

$$\min\left[\sum_x r^2(x)\right] \qquad (\text{II})$$

que explica a origem do nome dado ao método.



Ex: Os pontos do experimento e as tentativas de ajustar uma reta.

⇒ Regressão Linear:

- Quando a função aproximadora, $g(x)$, deve ser uma reta, o método dos mínimos quadrados reduz-se a uma "Regressão Linear". Esse termo é largamente usado em Engenharia, economia, e outras áreas do conhecimento sempre que um conjunto de pontos necessita ser aproximado por uma reta. Assim, o objetivo da Regressão Linear é aproximar uma função $f(x)$ por uma outra função, $g(x)$, da família $g(x) = a + bx$, usando o método dos mínimos quadrados.

- Isso significa que se deseja determinar os parâmetros a e b da reta $f(x) = a + bx$ de modo que a soma dos quadrados dos erros em cada ponto de $f(x)$ seja a menor possível, como determinado pela expressão (II).

Isso é feito através de um sistema linear dado por:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix} \quad (\text{III})$$

Mais adiante será apresentado uma generalização do método que nos permitirá deduzir a expressão (III), bem como outras aplicações do método dos mínimos quadrados.

- Assim, uma vez de posse dos valores dos pontos que compõem $f(x) = \{x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n\}$, pode-se resolver o sistema linear e obter a e b.

Exemplo ①: Como resultado de um experimento prático, foram obtidos os seguintes valores para a função f(x):

x	0	1	2	3	4
$f(x)$	0	1	1	4	4

1) Para determinar qual é a melhor reta que ajusta esses pontos deve-se achar $g(x) = a + bx$. Para tanto, reorganizam-se os valores de forma a satisfazer a expressão (III):

$n = 5$

$x_1 = 0 \quad x_2 = 1 \quad x_3 = 2 \quad x_4 = 3 \quad x_5 = 4$

$y_1 = 0 \quad y_2 = 1 \quad y_3 = 1 \quad y_4 = 4 \quad y_5 = 4$

2. Podem-se calcular os termos que serão usados no sistema linear:

$$\sum_{i=1}^{5} 1 = 1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 0 + 1 + 2 + 3 + 4 = 10$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 = 0^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 = 30$$

$$\sum_{i=1}^{5} y_i = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 = 0 + 1 + 1 + 4 + 4 = 10$$

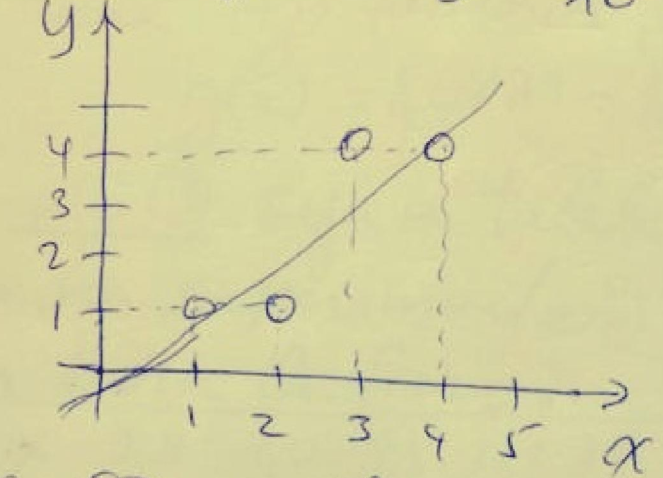
$$\sum_{i=1}^{5} x_i y_i = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 + x_4y_4 + x_5y_5 = 0.0 + 1.1 + 2.1 + 3.4 + 4.4 = 31$$

Agora, o sistema pode ser montado:

$$\begin{bmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 31 \end{bmatrix}$$

3. Resolve-se o sistema, de onde se obtêm os valores de $a = -1/5$ e $b = 11/10$. Logo, a função $g(x)$ pode ser expressa por

$$g(x) = -\frac{1}{5} + \frac{11}{10}x$$



Exemplo (2) Ajuste uma reta aos pontos:

x	-1	0	1	2	3	4	5	6
$f(x)$	10	9	7	5	4	3	0	-1

1. Cálculo dos parametros do sistema de Regressão Lineal:

$$\sum_{i=1}^{8} 1 = 8 \qquad \sum_{i=1}^{8} y_i = 37$$

$$\sum_{i=1}^{8} x_i = 20 \qquad \sum_{i=1}^{8} x_i y_i = 25$$

$$\sum_{i=1}^{8} x_i^2 = 92$$

2. O sistema fica:

$$\begin{bmatrix} 8 & 20 \\ 20 & 92 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 37 \\ 25 \end{bmatrix}$$

que uma vez resolvido, resulta então

$$g(x) = 8{,}6429 - 1{,}6071\,x$$

Exemplo 3 Seja a tabela relacionada com dados experimentais de magnetização de uma barra de ferro:

x	3,8	7,0	9,5	11,3	17,5	31,5	45,0	64,0	95,0
$f(x)$	10,0	12,5	13,4	14,0	15,0	16,0	16,5	17,0	17,5

onde H é o campo magnético e B é a densidade de fluxo magnético induzido por H.

- Sabemos que a densidade de fluxo magnético induzido tem um comportamento semelhante ao representado na figura 1, e que pode ser aproximado por

$$B = \frac{H}{a + bH}$$

onde temos que determinar a e b.

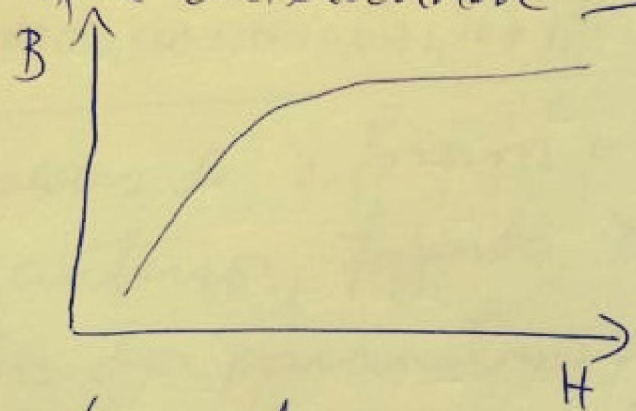


Fig 1 comportamento aproximado da densidade de fluxo induzido (B) em função do campo magnético (H).

1. Como a função não é linear nesses parâmetros, temos que transformar a função para aplicar a Regressão Linear. Uma maneira bem simples de linearizar essa expressão é fazer

$$\frac{H}{B} = a + bH$$

obtendo uma função linear, ou seja, uma reta, na qual $H \rightarrow x$ e $(H/B) \rightarrow y$. Como consequência dessa transformação, deve-se reescrever a tabela com os novos valores:

x	3,8	7,0	9,5	11,3	17,5	31,5	45,0	64,0	95,0
Y	0,038	0,560	0,704	0,807	1,167	1,969	2,737	3,765	5,489

onde os valores de Y foram obtidos da tabela anterior, fazendo $Y = H/B$.

2. cálculo dos parametros do sistema de regressão linear para os valores x e Y.

$$\sum_{i=1}^{9} i = 9 \qquad \sum_{i=1}^{9} Y_i = 17,508$$

$$\sum_{i=1}^{9} x_i = 284,6 \qquad \sum_{i=1}^{9} x_i Y_i = 983,047$$

$$\sum_{i=1}^{9} x_i^2 = 16.725,88$$

3. O sistema fica:

$$\begin{bmatrix} 9 & 284{,}6 \\ 284{,}6 & 16.725{,}88 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17{,}508 \\ 983{,}047 \end{bmatrix}$$

que, uma vez resolvido, resulta em:

$$g(x) = 0{,}174 + 0{,}056x$$

4. Deve-se agora retornar aos parametros originais, H e B. Para tanto, substitui-se $\underline{x}$ por H e Y por H/B. O resultado é $\frac{H}{B} = 0{,}174 + 0{,}056H$

que pode ser reescrito na forma desejada como $B = \frac{H}{0{,}174 + 0{,}056H}$ //

Forma original $y = f(x)$	Forma linearizada $y = AX + B$	Troca de variáveis
$y = \frac{A}{x} + B$	$y = A\frac{1}{x} + B$	$X = \frac{1}{x}$, $Y = y$
$y = \frac{A}{x + B}$	$y = -\frac{1}{B}(xy) + \frac{A}{B}$	$X = xy$ $Y = y$
$y = \frac{1}{Ax + B}$	$\frac{1}{y} = Ax + B$	$X = x$ $Y = \frac{1}{y}$
$y = A\ln x + B$	$y = A\ln x + B$	$X = \ln x$ $Y = y$
$y = Be^{Ax}$	$\ln y = Ax + \ln B$	$X = x$ $Y = \ln y$
$y = Bx^A$	$\ln y = A\ln x + \ln B$	$X = \ln x$, $Y = \ln y$
$y = (Ax + B)^2$	$\sqrt{y} = Ax + B$	$X = x$ $Y = \sqrt{y}$
$y = Bxe^{Ax}$	$\ln\frac{y}{x} = Ax + \ln B$	$X = x$ $Y = \ln\frac{y}{x}$
$y = \frac{1}{1 + Be^{Ax}}$	$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = Ax + \ln B$	$X = x$ $Y = \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right)$

5º NT I - EXERCÍCIOS - 21/12/20

1) Dada a tabela de pontos experimentais

X	1	2	3	4	5
Y	2,2	3,3	4,2	5,1	6,3

obtenha a reta que melhor ajusta os pontos através do método de regressão linear.

2. A função $f(x) = \sin(x)$ no intervalo $x = \{-0{,}05, \ldots 0{,}05\}$ pode ser ajustada por uma reta? crie uma tabela com valores para x e f(x) no intervalo dado e ajuste uma reta aos pontos.

3. Uma equipe de astronomos mediu o brilho de uma estrela ao longo de cinco anos e obteve os seguintes resultados

Ano	2003	2004	2005	2006	2007
Brilho	3,2	3,0	2,9	2,85	2,7

a. Escreva a função $f(x)=ax+b$, onde x é o ano e $f(x)$ é o brilho da estrela que melhor ajusta estes pontos pelo método dos mínimos quadrados.

b. Qual será o brilho previsto para esta estrela em 2020?

4. Experimentos feitos com uma espécies de mamíferos chegaram a seguinte tabela, que relaciona o peso médio da espécie em quilogramas com a frequência cardíaca média em batimentos por minuto.

Peso (Kg)	Batimento cardíaco (min)
0,5	286,5789
2	202,656
10	135,5243
100	76,21089
200	64,08547

Sabendo-se que uma função do tipo $B=ap^{\beta}$, onde B é a frequência do batimento cardíaco e p é o peso do animal, obtenha uma expressão para esta relação e faça uma estimativa para a frequência cardíaca do ser humano, tomando como peso médio para um homem adulto médio 80kg.