

Método dos Mínimos Quadrados

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio



Método dos Mínimos Quadrados

- ▶ Sistemas lineares inconsistentes
 - ▶ Número de equações é maior que o número de incógnitas
 - ▶ Pode-se achar a “melhor” solução aproximada

$$A_{m \times n} \mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad n < m$$



Método dos Mínimos Quadrados

- ▶ Sistemas lineares inconsistentes
 - ▶ Número de equações é maior que o número de incógnitas
 - ▶ Pode-se achar a “melhor” solução aproximada

$$A_{m \times n} \mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad n < m$$

- ▶ Se “melhor” for menor distância Euclidiana \Rightarrow **MMQ**



Método dos Mínimos Quadrados

Sistema de equações inconsistentes

$$\begin{cases} x_0 + x_1 = 2 \\ x_0 - x_1 = 1 \\ x_0 + x_1 = 3 \end{cases}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Sistema de equações inconsistentes

$$\begin{cases} x_0 + x_1 = 2 \\ x_0 - x_1 = 1 \\ x_0 + x_1 = 3 \end{cases}$$

- Primeira e terceira equações são contraditórias!



Método dos Mínimos Quadrados

Sistema de equações inconsistentes

$$\begin{cases} x_0 + x_1 = 2 \\ x_0 - x_1 = 1 \\ x_0 + x_1 = 3 \end{cases}$$

- ▶ Primeira e terceira equações são contraditórias!

Objetivo

- ▶ Achar solução que melhor aproxime todas as equações



Método dos Mínimos Quadrados

Reescrevendo o exemplo em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Reescrevendo o exemplo em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Alternativamente:

$$x_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Reescrevendo o exemplo em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Alternativamente:

$$x_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

- Qualquer sistema $m \times n$ na forma $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ pode ser expresso por uma equação vetorial na forma:

$$x_0 \mathbf{v}_0 + x_1 \mathbf{v}_1 + \dots + x_{n-1} \mathbf{v}_{n-1} = \mathbf{b}$$

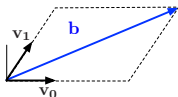
- isto é, \mathbf{b} é expresso como uma combinação linear de n vetores \mathbf{v}_i 's com coeficientes x_i 's, no espaço \mathbb{R}^m



Método dos Mínimos Quadrados

No nosso exemplo: Combinação linear de 2 vetores no espaço $3D$

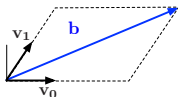
- ▶ Combinação linear de dois vetores formam um plano
- ▶ Qualquer vetor neste plano pode ser representado



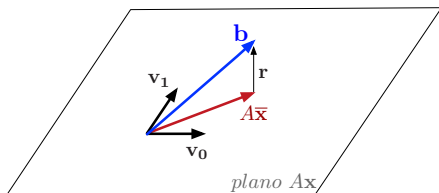
Método dos Mínimos Quadrados

No nosso exemplo: Combinação linear de 2 vetores no espaço $3D$

- ▶ Combinação linear de dois vetores formam um plano
- ▶ Qualquer vetor neste plano pode ser representado



- ▶ Plano formado pelos vetores: Ax
- ▶ Solução exata só existe se b estiver neste plano
- ▶ Melhor solução aproxima b por sua projeção no plano: $A\bar{x}$
- ▶ Vetor residual ortogonal ao plano: $r = b - A\bar{x}$



Método dos Mínimos Quadrados

Perpendicularidade do vetor residual:

$$(\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) \perp A\mathbf{x} \text{ / } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$



Lembrando: \mathbf{v} e \mathbf{w} são ortogonais se $\mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0$



Método dos Mínimos Quadrados

Perpendicularidade do vetor residual:

$$(\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) \perp A\mathbf{x} \ / \ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

► Logo:

$$(A\mathbf{x})^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) = 0 \ \forall \ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

$$\mathbf{x}^T A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) = 0 \ \forall \ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Então:

$$\mathbf{x}^T \perp A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}})$$

► para qualquer $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, inclusive o próprio $A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}})$



Lembrando: \mathbf{v} e \mathbf{w} são ortogonais se $\mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0$



Método dos Mínimos Quadrados

Perpendicularidade do vetor residual:

$$(\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) \perp A\mathbf{x} \text{ / } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

► Logo:

$$(A\mathbf{x})^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

$$\mathbf{x}^T A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Então:

$$\mathbf{x}^T \perp A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}})$$

► para qualquer $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, inclusive o próprio $A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}})$

Isso implica que esse vetor deve ser nulo:

$$A^T (\mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}) = 0$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

Lembrando: \mathbf{v} e \mathbf{w} são ortogonais se $\mathbf{v}^T \mathbf{w} = 0$



Método dos Mínimos Quadrados

Dado um sistema inconsistente:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- ▶ O **MMQ** fornece equações normais:

$$(A^T A) \bar{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$$

- ▶ que minimiza o vetor residual $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}$
- ▶ Note que $A^T A$ é sempre simétrica

$$(A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A$$



Método dos Mínimos Quadrados

Retomando nosso exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Retomando nosso exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Retomando nosso exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ficamos com o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ficamos com o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

► Solução:

$$\begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ficamos com o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

► Solução:

$$\begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$

Substituindo no sistema original:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{10}{4} \\ \frac{4}{4} \\ \frac{10}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1 \\ 2.5 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Resíduo

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1 \\ 2.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

- ▶ Erro regressivo: MMQ minimiza este erro
 - ▶ Pela norma-2 do vetor \mathbf{r}

$$\|\mathbf{r}\|_2 = \sqrt{r_0^2 + r_1^2 + \dots r_{n-1}^2}$$

- ▶ Pela raiz da média do erro ao quadrado
 - ▶ RMSE (*root mean squared error*)

$$RMSE = \frac{\|\mathbf{r}\|_2}{\sqrt{n}}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Resíduo

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1 \\ 2.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

- ▶ Erro regressivo: MMQ minimiza este erro
 - ▶ Pela norma-2 do vetor \mathbf{r}

$$\|\mathbf{r}\|_2 = \sqrt{r_0^2 + r_1^2 + \dots r_{n-1}^2}$$

- ▶ Pela raiz da média do erro ao quadrado
 - ▶ RMSE (*root mean squared error*)

$$RMSE = \frac{\|\mathbf{r}\|_2}{\sqrt{n}}$$

- ▶ Se o erro for nulo, encontra-se a solução do problema original
 - ▶ Uma solução existia
 - ▶ O vetor \mathbf{b} estava no plano $A\mathbf{x}$



Ajuste de modelos

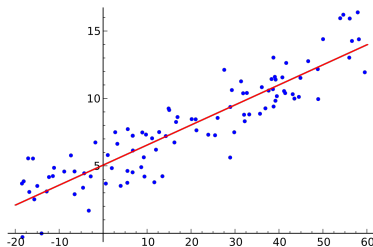
Regressão Linear

Dado um conjunto de pontos (x_i, y_i) ,
achar a reta que minimiza o erro

- ▶ Achar a e b em:

$$y_i = a + bx_i + e_i$$

- ▶ tal que $\sum e_i^2$ seja mínimo



Regressão Linear

Achar mínimo da função:

$$S(a, b) = \sum (y_i - a - bx_i)^2$$



Regressão Linear

Achar mínimo da função:

$$S(a, b) = \sum (y_i - a - bx_i)^2$$

- Derivando e igualando a zero (mínimo de função):

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum (y_i - a - bx_i) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum x_i (y_i - a - bx_i) = 0$$



Regressão Linear

- Dividindo a primeira equação por $2n$:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n} \sum (y_i - a - bx_i) &= -\frac{1}{n} \left(\sum y_i - \sum a - \sum bx_i \right) = \\ &= -\frac{1}{n} (n\bar{y} - na - nb\bar{x}) = -\bar{y} + a + b\bar{x} = 0 \\ \therefore \boxed{a = \bar{y} - b\bar{x}} \end{aligned}$$



Regressão Linear

- ▶ Dividindo a primeira equação por $2n$:

$$\begin{aligned}-\frac{1}{n} \sum (y_i - a - bx_i) &= -\frac{1}{n} \left(\sum y_i - \sum a - \sum bx_i \right) = \\ &= -\frac{1}{n} (n\bar{y} - na - nb\bar{x}) = -\bar{y} + a + b\bar{x} = 0 \\ \therefore \boxed{a = \bar{y} - b\bar{x}}\end{aligned}$$

- ▶ Substituindo na segunda equação:

$$\begin{aligned}-2 \sum x_i (y_i - \bar{y} + b\bar{x} - bx_i) &= \sum (x_i(y_i - \bar{y}) + x_i b(\bar{x} - x_i)) = \\ &= \sum (x_i(y_i - \bar{y})) + b \sum (x_i(\bar{x} - x_i)) = 0 \\ b &= \frac{\sum (x_i(y_i - \bar{y}))}{\sum (x_i(\bar{x} - x_i))} = \frac{\sum x_i y_i - \bar{y} \sum x_i}{\sum x_i^2 - \bar{x} \sum x_i} \\ \boxed{b = \frac{\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}}\end{aligned}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow A^T A \bar{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$$

► Sistema inconsistente

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \dots \\ y_{n-1} \end{bmatrix}$$

► Solução

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & \dots & x_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \dots \\ y_{n-1} \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{bmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{bmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

► Da primeira equação:

$$na + n\bar{x}b = n\bar{y}$$

$$\boxed{a = \bar{y} - \bar{x}b}$$

► Da segunda equação:

$$n\bar{x}a + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$n\bar{x}(\bar{y} - \bar{x}b) + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$n\bar{x}\bar{y} - n\bar{x}^2 b + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$\boxed{b = \frac{\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix} \quad \therefore \begin{bmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n\bar{y} \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

► Da primeira equação:

$$na + n\bar{x}b = n\bar{y}$$

$$\boxed{a = \bar{y} - \bar{x}b}$$

► Da segunda equação:

$$n\bar{x}a + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$n\bar{x}(\bar{y} - \bar{x}b) + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$n\bar{x}\bar{y} - n\bar{x}^2 b + b \sum x_i^2 = \sum x_i y_i$$

$$\boxed{b = \frac{\sum x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}}$$

► Que são as mesmas fórmulas da Regressão Linear



Método dos Mínimos Quadrados

Aplicações

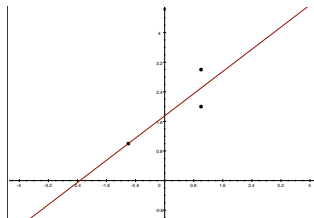
- ▶ Ajustar um modelo simples a um conjunto de pontos
 - ▶ Ao invés de ajustar um polinômio que honre todos os pontos
- ▶ Ajustar a um conjunto de pontos com erros de aquisição



Ajuste linear

Exemplo:

- ▶ Achar melhor reta que aproxima um conjunto de pontos (x_i, y_i) .
- ▶ Modelo (linha reta): $y = a + bx$
- ▶ Exemplo: $(1,2)$, $(-1,1)$ e $(1,3)$



Ajuste linear

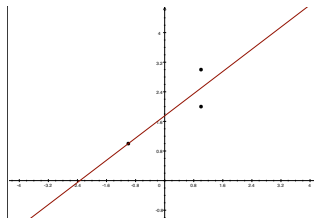
Exemplo:

- ▶ Achar melhor reta que aproxima um conjunto de pontos (x_i, y_i) .
- ▶ Modelo (linha reta): $y = a + bx$
- ▶ Exemplo: $(1,2)$, $(-1,1)$ e $(1,3)$
 - ▶ Sistema inconsistente

$$a + 1b = 2$$

$$a + (-1)b = 1$$

$$a + 1b = 3$$



Ajuste linear

Exemplo:

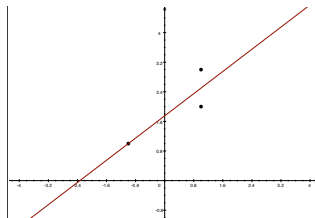
- ▶ Achar melhor reta que aproxima um conjunto de pontos (x_i, y_i) .
- ▶ Modelo (linha reta): $y = a + bx$
- ▶ Exemplo: $(1,2)$, $(-1,1)$ e $(1,3)$
 - ▶ Sistema inconsistente

$$a + 1b = 2$$

$$a + (-1)b = 1$$

$$a + 1b = 3$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



Ajuste linear

Exemplo:

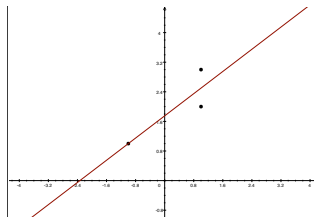
- ▶ Achar melhor reta que aproxima um conjunto de pontos (x_i, y_i) .
- ▶ Modelo (linha reta): $y = a + bx$
- ▶ Exemplo: $(1,2)$, $(-1,1)$ e $(1,3)$
 - ▶ Sistema inconsistente

$$a + 1b = 2$$

$$a + (-1)b = 1$$

$$a + 1b = 3$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$



▶ Como vimos:

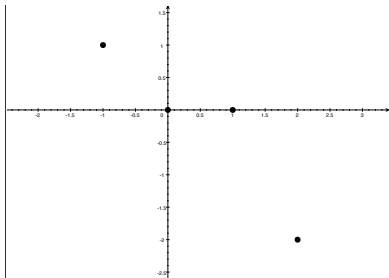
$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$
$$\Rightarrow y = \frac{7}{4} + \frac{3}{4}x$$



Método dos Mínimos Quadrados

Considere os pontos $(-1, 1)$, $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(2, -2)$

- Ajuste de uma reta: $y = a + bx$

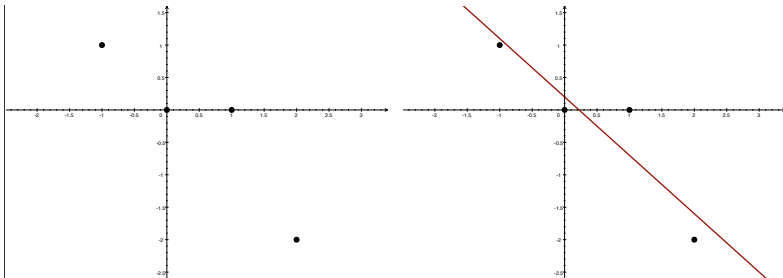


Método dos Mínimos Quadrados

Considere os pontos $(-1, 1)$, $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(2, -2)$

► Ajuste de uma reta: $y = a + bx$

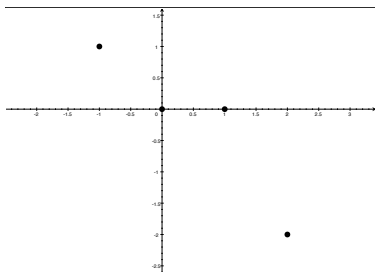
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ -0.9 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Considere os pontos $(-1, 1)$, $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(2, -2)$

- Ajuste de uma parábola: $y = a + bx + cx^2$

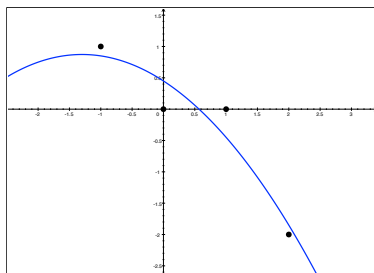
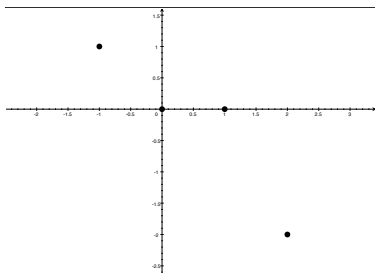


Método dos Mínimos Quadrados

Considere os pontos $(-1, 1)$, $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(2, -2)$

- Ajuste de uma parábola: $y = a + bx + cx^2$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.45 \\ -0.65 \\ -0.25 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

Estudo de modelos

- ▶ Dados periódicos
 - ▶ Exemplo: variação de temperatura durante o dia
 - ▶ Washington, DC (01/01/2001)

h	t	T
0	0	-2.2
3	1/8	-2.8
6	1/4	-6.1
9	3/8	-3.9
12	1/2	-0.0
15	5/8	1.1
18	3/4	-0.6
21	7/8	-1.1



Método dos Mínimos Quadrados

Estudo de modelos

- ▶ Dados periódicos
 - ▶ Exemplo: variação de temperatura durante o dia
 - ▶ Washington, DC (01/01/2001)

h	t	T
0	0	-2.2
3	1/8	-2.8
6	1/4	-6.1
9	3/8	-3.9
12	1/2	-0.0
15	5/8	1.1
18	3/4	-0.6
21	7/8	-1.1

Modelo:

$$y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$$



Método dos Mínimos Quadrados

Estudo de modelos

- ▶ Dados periódicos
 - ▶ Exemplo: variação de temperatura durante o dia
 - ▶ Washington, DC (01/01/2001)

h	t	T
0	0	-2.2
3	1/8	-2.8
6	1/4	-6.1
9	3/8	-3.9
12	1/2	-0.0
15	5/8	1.1
18	3/4	-0.6
21	7/8	-1.1

Modelo:

$$y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$$

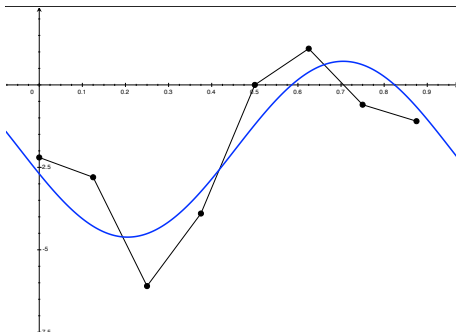
Sistema inconsistente

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos 2\pi t_0 & \sin 2\pi t_0 \\ 1 & \cos 2\pi t_1 & \sin 2\pi t_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cos 2\pi t_{n-1} & \sin 2\pi t_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_{n-1} \end{bmatrix}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Dados periódicos

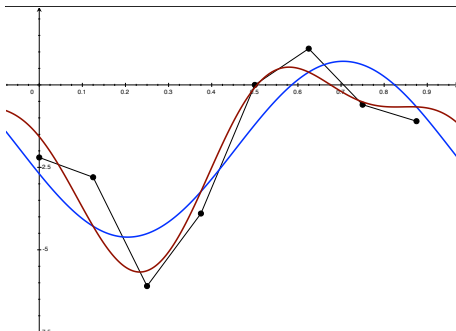
- ▶ Exemplo: variação de temperatura durante o dia
 - ▶ Modelo 1: $y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$
 - ▶ Anti-simetria a.m. e p.m.



Método dos Mínimos Quadrados

Dados periódicos

- ▶ Exemplo: variação de temperatura durante o dia
 - ▶ Modelo 1: $y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$
 - ▶ Anti-simetria a.m. e p.m.
 - ▶ Modelo 2: $y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t + c_3 \cos 4\pi t$
 - ▶ Modelo melhorado



Método dos Mínimos Quadrados

Como usar MMQ para problemas não lineares?

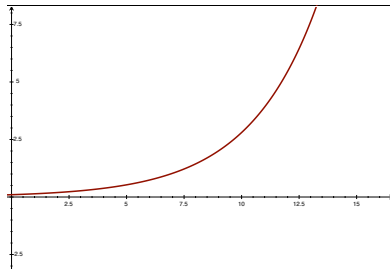


Método dos Mínimos Quadrados

Como usar MMQ para problemas não lineares?

Exemplo

- Crescimento populacional exponencial



Método dos Mínimos Quadrados

Como usar MMQ para problemas não lineares?

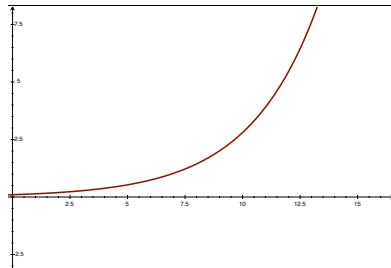
Exemplo

- Crescimento populacional exponencial

Modelo exponencial:

$$y = a e^{bx}$$

- Não pode ser resolvido diretamente pelo MMQ



Método dos Mínimos Quadrados

Modelos não lineares

Solução $\left\{ \begin{array}{l} \text{Resolver problema não linear} \\ \text{Transformar em modelo linear – **Linearização**} \end{array} \right.$



Linearização

Modelo exponencial

$$y = a e^{bx}$$



Linearização

Modelo exponencial

$$y = a e^{bx}$$

Linearizando:

$$\ln y = \ln (a e^{bx})$$

$$\ln y = \ln a + bx$$

$$\ln y = k + bx, \quad a = e^k$$



Linearização

Modelo exponencial

$$y = a e^{bx}$$

Linearizando:

$$\ln y = \ln (a e^{bx})$$

$$\ln y = \ln a + bx$$

$$\boxed{\ln y = k + bx, \quad a = e^k}$$

- ▶ Note que estamos resolvendo um problema diferente
 - ▶ Ao invés de minimizar o erro:

$$\sum (ae^{bx_i} - y_i)^2$$

- ▶ Estamos minimizando o erro no espaço logarítmico:

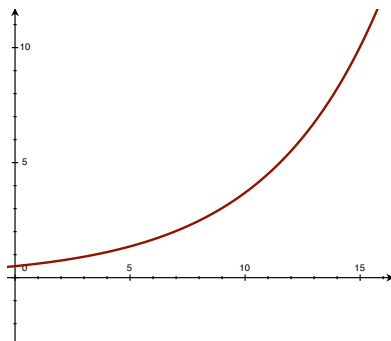
$$\sum (\ln a + bx_i - \ln y_i)^2$$



Linearização

Modelo de potência simples

$$y = a x^b$$



Linearização

Modelo de potência simples

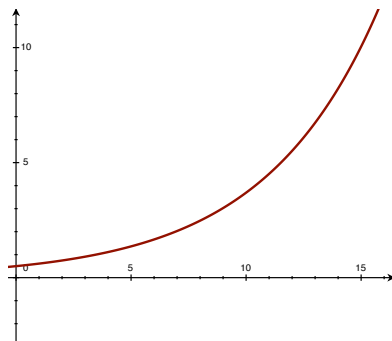
$$y = a x^b$$

Linearizando:

$$\log y = \log (a x^b)$$

$$\log y = \log a + b \log x$$

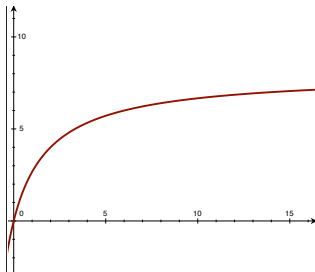
$$\log y = k + b \log x, \quad a = 10^k$$



Linearização

Modelo de crescimento com saturação

$$y = a \frac{x}{x + b}$$



Linearização

Modelo de crescimento com saturação

$$y = a \frac{x}{x + b}$$

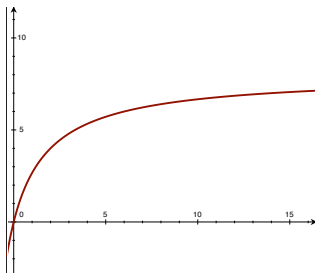
Linearizando:

$$\frac{1}{y} = \frac{x + b}{a x}$$

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{a} + \frac{b}{a} \frac{1}{x}$$

$$\boxed{\frac{1}{y} = k_1 + k_2 \frac{1}{x}}$$

com $\boxed{a = \frac{1}{k_1}}$ e $\boxed{b = k_2 a}$



Exercício proposto

Usando Mínimos Quadrados, como fazer o ajuste de um conjunto de pontos (x_i, y_i) num modelo de potência simples: $y = ax^b$. Qual o erro que será minimizado?

