Método dos Mínimos Quadrados

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio

Sistemas inconsistentes

Considere o sistema de equações

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

Sistemas inconsistentes

Considere o sistema de equações

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

- Primeira e terceira equações são contraditórias!

Sistemas inconsistentes

Considere o sistema de equações

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

- Primeira e terceira equações são contraditórias!

Objetivo

- Achar solução que melhor aproxime todas as equações

Sistemas inconsistentes

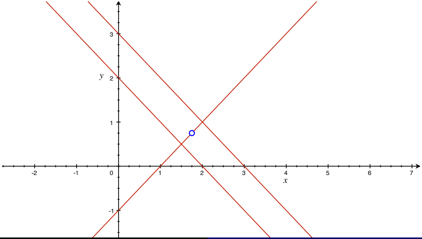
Considere o sistema de equações

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

- Primeira e terceira equações são contraditórias!

Objetivo

- Achar solução que melhor aproxime todas as equações



Método dos Mínimos Quadrados

- 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

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:

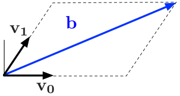
$$x_0\mathbf{v}_0 + x_1\mathbf{v}_1 + \ldots + x_{n-1}\mathbf{v}_{n-1} = \mathbf{b}$$

  - 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 $3D$

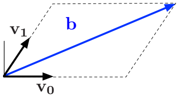
- Combinação linear de dois vetores formam um plano
- Qualquer vetor neste plano pode ser representado



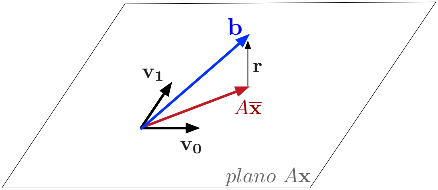
Método dos Mínimos Quadrados

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: $A\mathbf{x}$
- Solução exata só existe se **b** estiver neste plano
- Melhor solução aproxima **b** por sua projeção no plano: $A\overline{\mathbf{x}}$
- Vetor residual ortogonal ao plano: $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\overline{\mathbf{x}}$



Método dos Mínimos Quadrados

Perpendicularidade do vetor residual:

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

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:

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

Então:

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

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

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

Método dos Mínimos Quadrados

Perpendicularidade do vetor residual:

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

- Logo:

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

Então:

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

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

Isso implica que esse vetor deve ser nulo:

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

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

Método dos Mínimos Quadrados

Dado um sistema incosistente:

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

- 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 **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

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

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

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

  - 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

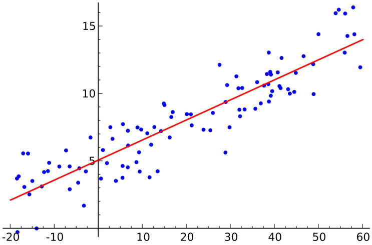
Regressão Linear

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 $2n$:

$$-\frac{1}{n}\sum(y_i - a - bx_i) = -\frac{1}{n}\left(\sum y_i - \sum a - \sum bx_i\right) =$$

$$= -\frac{1}{n}(n\overline{y} - na - nb\overline{x}) = -\overline{y} + a + b\overline{x} = 0$$

$$\therefore \boxed{a = \overline{y} - b\overline{x}}$$

Regressão Linear

- Dividindo a primeira equação por $2n$:

$$-\frac{1}{n}\sum(y_i - a - bx_i) = -\frac{1}{n}\left(\sum y_i - \sum a - \sum bx_i\right) =$$

$$= -\frac{1}{n}(n\overline{y} - na - nb\overline{x}) = -\overline{y} + a + b\overline{x} = 0$$

$$\therefore \boxed{a = \overline{y} - b\overline{x}}$$

- Substituindo na segunda equação:

$$-2\sum x_i(y_i - \overline{y} + b\overline{x} - bx_i) = \sum(x_i(y_i - \overline{y}) + x_i b(\overline{x} - x_i)) =$$

$$= \sum(x_i(y_i - \overline{y})) + b\sum(x_i(\overline{x} - x_i)) = 0$$

$$b = \frac{\sum(x_i(y_i - \overline{y}))}{\sum(x_i(\overline{x} - x_i))} = \frac{\sum x_i y_i - \overline{y}\sum x_i}{\sum x_i^2 - \overline{x}\sum x_i}$$

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

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

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

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

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

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

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

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

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

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

- Da primeira equação:

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

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

- Da segunda equação:

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

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

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

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

Método dos Mínimos Quadrados

Ajuste linear por MMQ

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

- Da primeira equação:

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

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

- Da segunda equação:

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

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

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

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

- Que são as mesmas fórmulas da Regressão Linear

Método dos Mínimos Quadrados

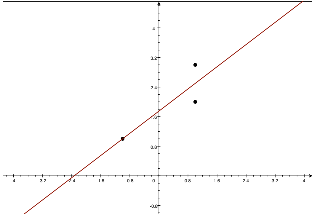
Aplicações

- 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)

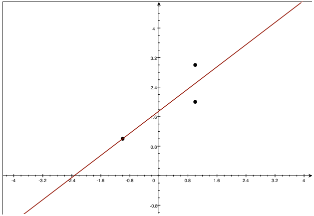


Ajuste linear

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

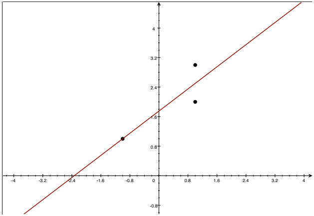
$$
\begin{aligned}
a + 1b &= 2 \\
a + (-1)b &= 1 \\
a + 1b &= 3
\end{aligned}
$$



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



$$\begin{aligned} a + 1b &= 2 \\ a + (-1)b &= 1 \\ a + 1b &= 3 \end{aligned}$$

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

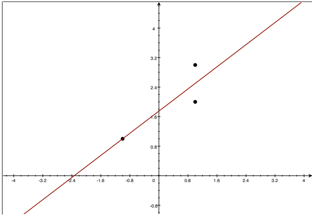
Ajuste linear

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

$$
\begin{aligned}
a + 1b &= 2 \\
a + (-1)b &= 1 \\
a + 1b &= 3
\end{aligned}
$$

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



- Como vimos:

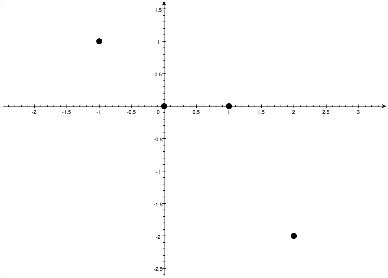
$$
\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}
$$

$$
\Rightarrow y = \frac{7}{4} + \frac{3}{4}x
$$

Método dos Mínimos Quadrados

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

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

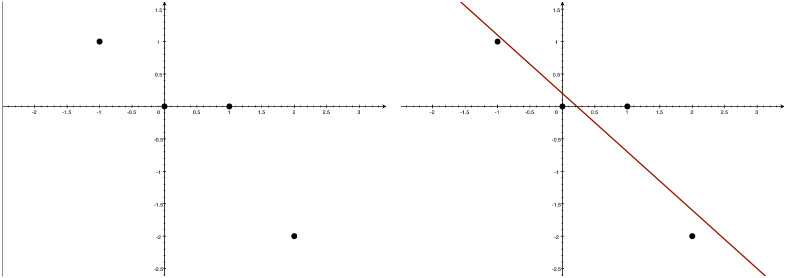


Método dos Mínimos Quadrados

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

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

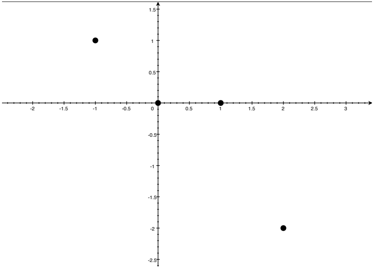
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ -0.9 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados

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

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

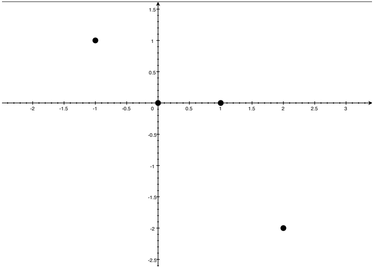


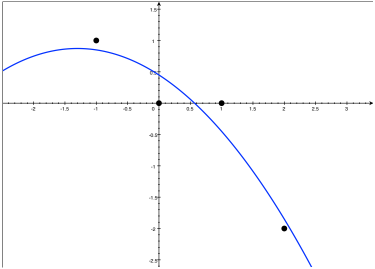
Método dos Mínimos Quadrados

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:

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

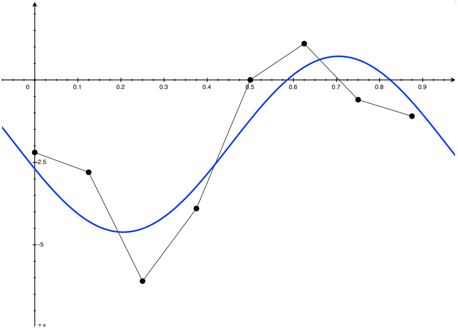
Sistema inconsistente

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

Método dos Mínimos Quadrados

Dados periódicos

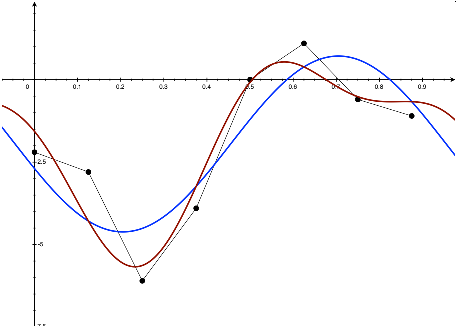
- Exemplo: variação de temperatura durante o dia
  - Modelo 1: $y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$
    - Anti-simetria a.m. e p.m.



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

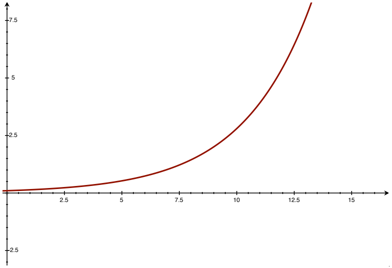
Como usar MMQ para problemas não lineares?

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?

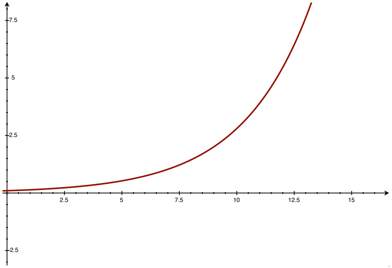
Exemplo

- Crescimento populacional exponencial

Modelo exponencial:

$$y = a\, e^{b\,x}$$

- Não pode ser resolvido diretamente pelo MMQ



Método dos Mínimos Quadrados

Modelos não lineares

$$\text{Solução} \begin{cases} \text{Resolver problema não linear} \\ \text{Transformar em modelo linear} - \textbf{Linearização} \end{cases}$$

Linearização

Modelo exponencial

$$y = a\, e^{b\,x}$$

Linearização

Modelo exponencial

$$y = a\, e^{b\, x}$$

Linearizando:

$$\ln y = \ln \left(a\, e^{b\, x} \right)$$

$$\ln y = \ln a + b\, x$$

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

Linearização

Modelo exponencial

$$y = a\, e^{b\,x}$$

Linearizando:

$$\ln y = \ln \left(a\, e^{b\,x} \right)$$

$$\ln y = \ln a + b\,x$$

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

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

$$\sum \left(a e^{b x_i} - y_i \right)^2$$

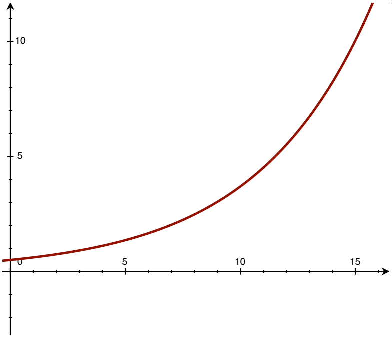
  - Estamos minimizando o erro no espaço logarítmico:

$$\sum \left(\ln a + b x_i - \ln y_i \right)^2$$

Linearização

Modelo de potência simples

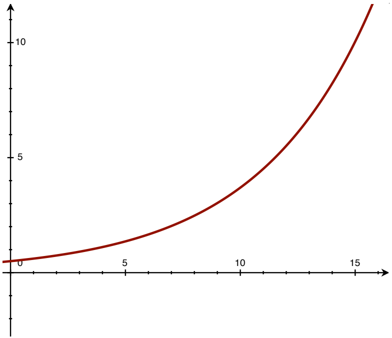
$$y = a\,x^b$$



Linearização

Modelo de potência simples

$$y = a\,x^b$$



Linearizando:

$$\log y = \log\left(a\,x^b\right)$$

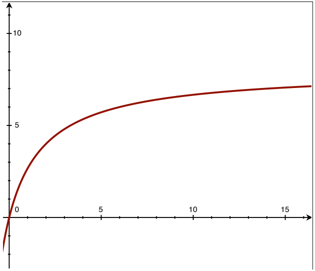
$$\log y = \log a + b\,\log x$$

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

Linearização

Modelo de crescimento com saturação

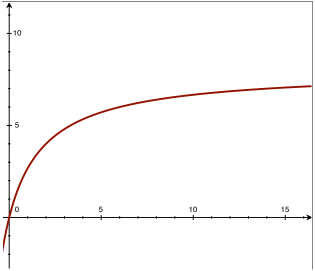
$$y = a\frac{x}{x+b}$$



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 $\boxed{a = \dfrac{1}{k_1}}$ 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?