PEGAR VOLTADO PARA A ALGEBRA LINEAR

**Introdução**

O **Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)**, ou Mínimos Quadrados Ordinários (MQO) ou OLS (do inglês *Ordinary Least Squares*) é uma técnica demelhoramento da matemática que procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando diminuir a soma dos quadrados das diferenças entre o valor estimado e os dados notados (suas diferenças são chamadas de resíduos). É a forma de estimar mais amplamente utilizada na econometria. Equivale a um estimador que minimiza a soma dos quadrados dos resíduos da regressão, de forma a aumentar o grau de ajuste do modelo aos dados observados. Um [requisito](https://pt.wikipedia.org/wiki/Requisito) para o método dos mínimos quadrados é que o fator imprevisível (erro) seja subdividido aleatoriamente e essa distribuição seja [normal](https://pt.wikipedia.org/wiki/Distribui%C3%A7%C3%A3o_Normal). O Teorema Gauss-Markov garante (mesmo que indiretamente) que o estimador de mínimos quadrados é não-enviesado de menor variância linear na variável resposta. Outro quesito é que o modelo é linear nos parâmetros, onde, as variáveis apresentam uma relação linear entre si. Em contrário, deveria ser usado um modelo de regressão não-linear. Carl Friedrich Gauss seria como o desenvolvedor das bases fundamentais do método dos mínimos quadrados, em 1795, quando Gauss tinha apenas dezoito anos. Entretanto,Adrien-Marie Legendre foi o primeiro a publicar o método em 1805, em seu *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes.* Gauss publicou suas conclusões apenas em 1809.

### **Método**

Em 1805, foi feita a primeira exposição clara do método dos mínimos quadrados. Técnica que consiste no procedimento algébrico para ajustar equações lineares aos dados, Laplace o fez para a forma da terra e Legendre criou um método a partir dele. Legendre foi imediatamente reconhecido astronômica e geometricamente na época. Carl Friedrich Gauss em 1809 seu método no cálculo de órbitas e corpos celestes. Ele citou ter possuído o método dos mínimos quadrados desde 1795. Naturalmente disputou prioridade com Legendre. Porém , para crédito de Gauss, ele foi além de Legendre e conseguiu conectar o método dos mínimos quadrados aos princípios da probabilidade e à distribuição normal . Ele conseguiu completar o programa de Laplace de especificar uma forma matemática da densidade de probabilidade para as observações, dependendo de um número finito de parâmetros desconhecidos, e definir um método de estimativa que diminui o erro de estimativa. Gauss mostrou que a média aritmética é de fato a melhor estimativa do parâmetro de localização, alterando a densidade de probabilidade e o método de estimativa. Então ele modificou o problema perguntando qual a forma de densidade deveria ter e qual o método da estimativa que deveria ser usado para obter a média aritmética como estimativa do parâmetro de localização. Nessa tentativa, ele criou a distribuição normal.

Das primeiras demonstrações da força do método de Gauss foi quando ele usou para prever a localização futura do recém-descoberto asteróide Ceres . Em 1º de janeiro de 1801, o astrônomo italiano Giuseppe Piazzi descobriu Ceres e foi capaz de rastrear seu caminho por 40 dias antes que se perdesse no brilho do sol. Com base nesses dados, os astrônomos desejaram determinar a localização de Ceres depois que ela surgiu de trás do sol, sem resolver as complicadas equações não lineares de Kepler do movimento planetário. As únicas previsões que permitiram com sucesso ao astrônomo húngaro Franz Xaver von Zach realocar Ceres foram aquelas realizadas por Gauss, de 24 anos, usando análise de mínimos quadrados.

Em 1810, depois de ler o trabalho de Gauss, Laplace, após provar o teorema de limite central , o usou como amostra da justificação para o método dos mínimos quadrados e da distribuição normal. Em 1822, Gauss afirmou que a abordagem de mínimos quadrados para análise de regressão é ótima para o modelo linear em que os erros têm média zero, não são relacionados e têm variedades iguais, o melhor estimador linear imparcial de os coeficientes é o estimador de mínimos quadrados. Este resultado é conhecido como teorema de Gauss-Markov. O conceito da análise de mínimos quadrados também foi formulada de forma independente pelo americano Robert Adrain em 1808. Dois séculos posteriores, os pesquisadores da teoria dos erros e da estatística encontraram muitas maneiras diferentes de implementar os mínimos quadrados.

## **História**

O método dos mínimos quadrados apresentou-se nos campos da astronomia e geodésia , à medida que cientistas e matemáticos procuravam propor soluções para os desafios de navegar nos oceanos da Terra durante a Era da Exploração. A descrição precisa do comportamento dos corpos celestes era a chave para permitir que os navios navegassem em mar aberto, onde os marinheiros não podiam mais depender de avistamentos em terra para navegação. O método foi o completar de vários avanços ocorridos ao longo do século XVIII: A combinação de diversas observações como sendo a melhor estimativa do valor verdadeiro; os erros decrescem com o acréscimo em vez de aumentar, talvez expressos pela primeira vez por Roger Cotes em 1722. A liga de diferentes observações é feita na *mesma* condição, ao contrário de simplesmente tentar o melhor para observar e registrar uma única observação com precisão. A abordagem era conhecida como método das médias. Esta abordagem foi usada especialmente por Tobias Mayer enquanto estudava as oscilações da lua em 1750, e por Pierre-Simon Laplace em seu trabalho para ensinar as diferenças no movimento de Júpiter e Saturno em 1788. A combinação de diferentes análises feitas em *diferentes* condições. O método veio a ser conhecido como o método do menor desvio absoluto. Foi notadamente realizado por Roger Joseph Boscovich em seu trabalho sobre a forma da Terra em 1757 e por Pierre-Simon Laplace para o mesmo problema em 1799. A difusão de um critério que pode ser qualificado para determinar quando a solução com o erro mínimo foi alcançada. Laplace tentou exemplificar uma forma matemática da consistência de probabilidade dos erros e definir um método de estimativa que diminuísse o erro de estimativa. Para este propósito, Laplace usou uma distribuição exponencial bilateral simétrica que agora intitulamos de distribuição de Laplace para modelar a distribuição do erro, e usou a soma dos desvios absolutos como erro de estimativa. Eram as suposições mais simples que ele poderia fazer e esperava ganhar a média aritmética como a melhor conjectura. Em vez disso, seu estimador foi a média posterior.

**Motivação do Método**

O Método tem sua origem no estudo dos valores máximos e mínimos de funções reais. Mais precisamente, na determinação do(s) ponto(s) mínimo(s) de uma função que representa o desvio estimado na busca pelo ajuste. Antes de abordarmos este e outros tópicos envolvidos na dedução e na aplicação do método, é conveniente nos desdobrarmos sobre o problema que motivou a sua elaboração e sua fragmentação.

No estudo de qualquer efeito, natural ou descendente de qualquer área de atividade humana, exibido por equações e curvas produzidas pela amizade de extensão que o regem constitui, uma das ferramentas mais eficazes desse estudo. Impossível imaginar o entendimento e o alcance da Teoria de Relatividade de Einstein, das Leis da Mecânica Clássica elaboradas por Newton, dos juros simples e compostos na Matemática Financeira, sem o suporte das fórmulas matemáticas que expressam todos os princípios aí envolvidos. Os temas acima citados são bastante conhecidos e têm suas bases matemáticas solidamente assentadas, porém há muitos outros fenômenos na vida cotidiana cuja análise será muito mais significativa e ampla se conseguirmos descrevê-los por meio de modelos matemáticos e com a inclusão de um termo que relaciona-se, em geral, com erros cometidos ou nas hipóteses do modelo ou na coleta de observações. Será por meio desses modelos que poderemos, por exemplo, estimar ocorrências futuras e direcionar tomadas de decisões. Podemos classificar os inúmeros fenômenos que ocorrem à nossa volta em dois grupos:

• Fenômenos determinísticos: São aqueles em que, uma vez conhecidas suas causas, podemos identificar e descrever sua situação final.

• Fenômenos aleatórios: São aqueles não passíveis de uma abordagem que nos permita descrever e identificar sua situação final, devido à própria natureza do fenômeno ou por conta das limitações de nossas observações.

O crescimento da população de determinada região em função do tempo, a produtividade de uma fazenda em função da quantidade de adubo nela utilizada, a variação de volume de determinada substância em função da temperatura a partir de dados obtidos em laboratório, são alguns dos incontáveis exemplos de fenômenos que carecem de modelos determinísticos que lhes deem representatividade e suporte analítico. Portanto, o problema consiste a partir de um conjunto de dados, gerados por experimentação ou observação, relacionando grandezas (variáveis) envolvidas na ocorrência de determinado fenômeno, encontrar um modelo matemático que descreva e expresse de maneira satisfatória tal fenômeno. As variáveis envolvidas em um determinado fenômeno podem estar relacionadas de acordo com uma das seguintes classificações:

• Determinísticas: Neste tipo de relação há uma fórmula matemática precisa vinculando as variáveis envolvidas, ou seja, é possível determinar-se com exatidão o valor de qualquer uma das variáveis quando se tem conhecimento dos valores das demais.

Exemplo: a lei dos juros compostos: M = C(1 + i)t, onde M é o montante, C é o capital aplicado, i é a taxa de juros e t é o tempo de aplicação.

• Semi Determinísticas: Neste tipo de relação há uma expressão matemática vinculando as variáveis envolvidas, porém desconhece-se algum ou alguns do(s) valor(es) dos parâmetros existentes na relação. Exemplo: a dilatação volumétrica de um corpo com a variação de temperatura pode ser expressa pela seguinte relação: ∆V = V0.γ.∆θ. Neste caso, a variação de volume ∆v e a variação de temperatura ∆θ são as variáveis de modelo, enquanto o coeficiente de dilatação volumétrica do corpo, γ, é o seu parâmetro. O coeficiente de dilatação volumétrica é uma constante específica de cada material e pode ser obtido a partir de dados obtidos experimentalmente ou tentando ajustar esses dados à relação conhecida.

• Empíricas: Neste caso, a relação entre as variáveis envolvidas é desconhecida.

Exemplo: A produtividade do solo de uma fazenda em função da quantidade de adubo nele introduzido. Dados obtidos experimentalmente, nos quais se busca ao máximo eliminar-se a influência de outros fatores, podem, depois do devido tratamento, levar à obtenção de uma relação satisfatória entre as duas grandezas.

Fundamentação

Explicação do Método

Exemplo 1

Exemplo 2

POSCOMP

2011-5

Aplicações Gerais

**Aplicações na Computação**

A equação AX = B é conhecida como equação do array linear. A função [numpy.linalg.lstsq()](https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.lstsq.html) pode ser usada para resolver a equação do array linear AX = B com o método dos mínimos quadrados em Python. Esta função utiliza matrizes e retorna a solução dos mínimos quadrados para a equação do array linear no formato de outra matriz. Veja o seguinte exemplo de código.

import numpy as np

A=[[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,0,0]]

B=[1,1,1,1,1]

X=np.linalg.lstsq(A, B, rcond = -1)

print (X[0])

Resultado:

[5.00000000e-01 5.00000000e-01 1.09109979e-16 1.64621130e-16]

No código anterior, calculamos a solução para a equação do array linear AX = B com a função np.linalg.lstsq() em Python. Este método se torna um pouco complicado quando começamos a adicionar pesos às nossas matrizes. Existem dois métodos principais que podemos usar para encontrar a solução para esse tipo de problema.

A primeira solução envolve o uso de indexação de array com o especificador np.newaxis para adicionar uma nova dimensão aos pesos. É ilustrado no exemplo de codificação abaixo.

import numpy as np

A=np.array([[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,0,0])

B = np.array([1,1,1,1,1])

W = np.array([1,2,3,4,5])

Aw = A \* np.sqrt(W[:,np.newaxis])

Bw = B \* np.sqrt(W)

X = np.linalg.lstsq(Aw, Bw, rcond = -1)

print(X[0])

Resultado:

[ 5.00000000e-01 5.00000000e-01 -4.40221936e-17 1.14889576e-17]

A segunda solução é um pouco mais legível e fácil de entender. Envolve transformar pesos em um array diagonal e então usá-la. Isso é demonstrado no exemplo de codificação abaixo.

import numpy as np

A=[[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,1,1],[1,1,0,0]]

B = [1,1,1,1,1]

W = [1,2,3,4,5]

W = np.sqrt(np.diag(W))

Aw = np.dot(W,A)

Bw = np.dot(B,W)

X = np.linalg.lstsq(Aw, Bw, rcond = -1)

print(X[0])

Resultado:

[ 5.00000000e-01 5.00000000e-01 -4.40221936e-17 1.14889576e-17]

Codificação

Explicação da Codificação

REFERÊNCIAS

com autor: SOBRENOME, Nome. Título da matéria. Nome do **site**, ano. Disponível em: <URL>. Acesso em: dia, mês e ano.

sem autor: TÍTULO da matéria. Nome do **site**, ano. Disponível em: <URL>. Acesso em: dia, mês e ano.

ALMEIDA, Renato N.. O Método dos mínimos quadrados: Estudo e aplicações para o ensino Médio. **UENF**, 2015. Disponível em: <https://uenf.br/posgraduacao/matematica/wp-content/uploads/sites/14/2017/09/28052015Renato-Neves-de-Almeida.pdf>. Acesso em: 19 de junho de 2022.

MÍNIMOS QUADRADOS EM NUMPY. DelftStack, 2021. Disponível em: <https://www.delftstack.com/pt/howto/numpy/python-least-squares-numpy/>. Acesso em: 19 de junho de 2022.