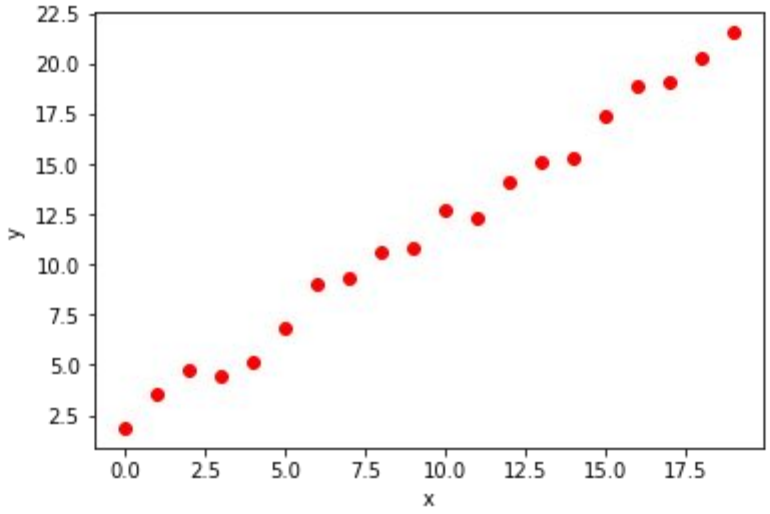
# Ajuste de Curvas
## (e em particular, Regressão Linear)

Fabricio Murai

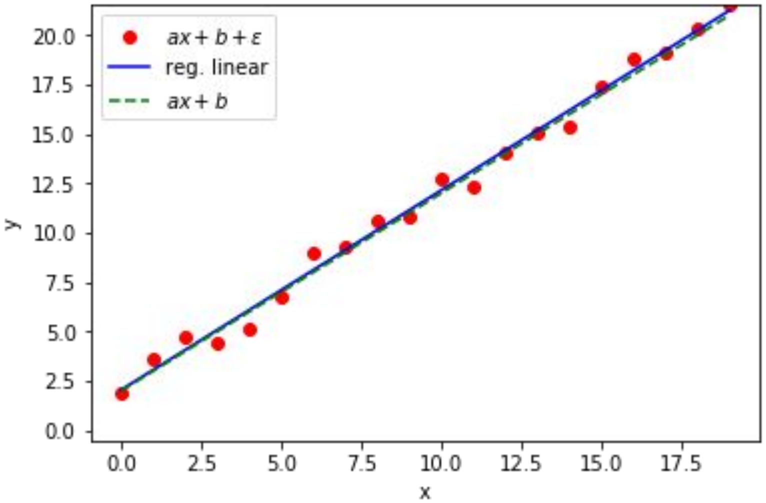
# Exemplo de ajuste de curva

- Quero encontrar uma função que relaciona x e y
- A função deve capturar a tendência, mas não precisa passar necessariamente pelos pontos
- Temos que assumir uma "cara" para essa função

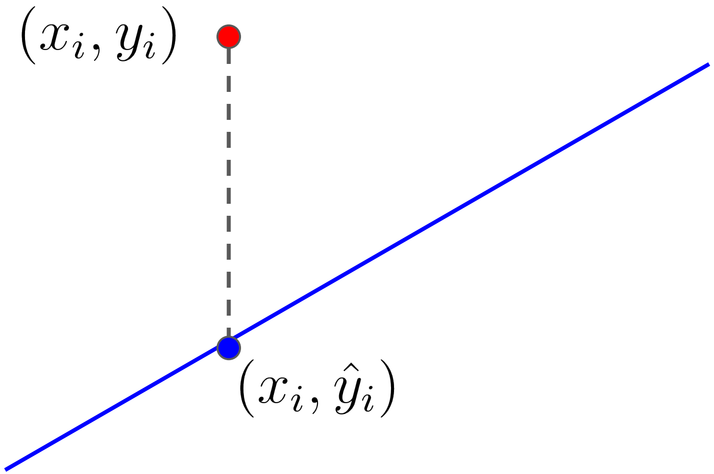


# Exemplo de ajuste de curva

- Assuma, por exemplo, f(x) = ax+b (poderíamos ter escolhido outra)
- Queremos encontrar parâmetros a e b que **melhor** ajustam a curva aos dados
- Como definir **melhor** ajuste?



# Como medir a qualidade em um ponto x?




Erro absoluto:

$$d_i = |\hat{y}_i - y_i|$$

Erro quadrático:

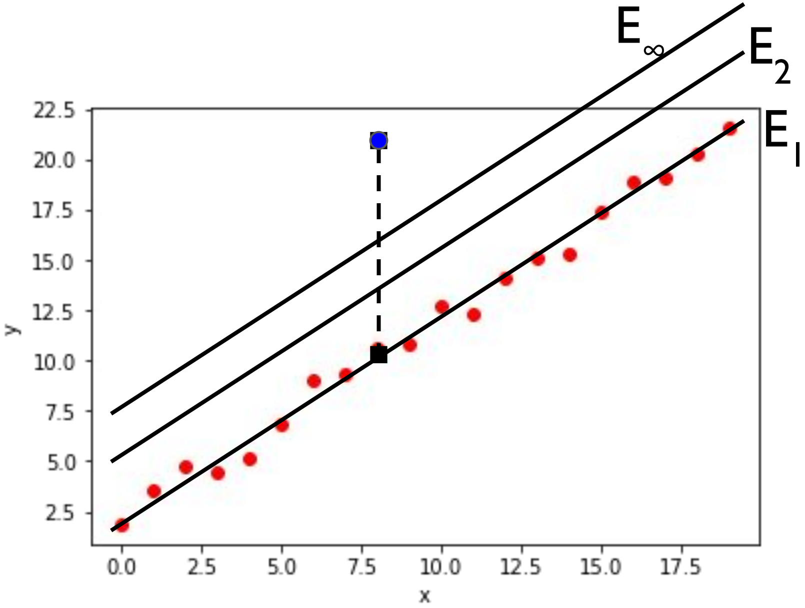
$$d_i = (\hat{y}_i - y_i)^2$$

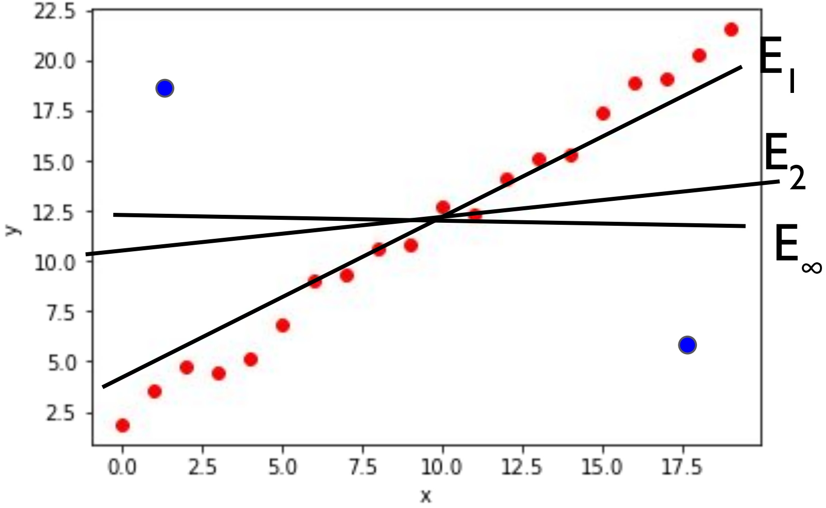
# Qualidade do ajuste

Exemplos de métricas levando em consideração pontos $(x_1,y_1)$, …, $(x_n,y_n)$:

1. Erro máximo $$E_\infty = \max_{i=1,\ldots,n} |\hat{y}_i - y_i|$$
2. Erro médio (Erro $L_1$) $$E_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1,\ldots,n} |\hat{y}_i - y_i|$$
3. Raiz do erro quadrático médio (Erro $L_2$) $$E_2 = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1,\ldots,n} (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

# Relação entre métrica de erro e outliers (pontos "fora da curva")



# Justificativa para o uso de $E_2$

Embora o erro médio absoluto $E_1$ seja mais robusto a outliers, a função módulo não possui derivada contínua.

Já (raiz do) erro médio quadrático é um bom compromisso: relativamente robusto e possui derivada contínua.

Ajuste de curvas visando minimizar (raiz do) erro médio quadrático é conhecido por **Método dos Quadrados Mínimos.**

# Método dos Quadrados Mínimos (MQM)

O MQM consiste em encontrar os parâmetros da função f que minimizam o erro

$$E_2 = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1,\ldots,n} (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

Isto é equivalente a minimizar

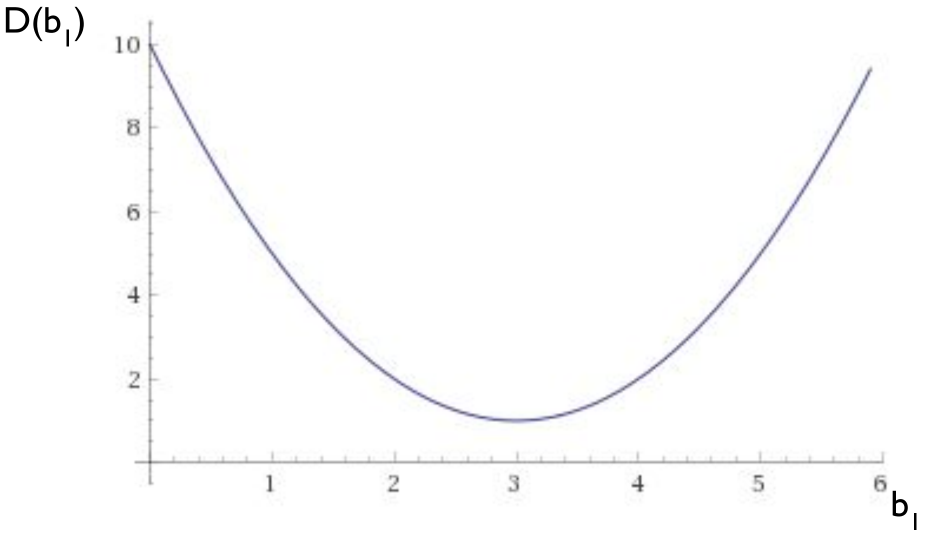
$$D(f) = \sum_{i=1,\ldots,n} (\hat{y}_i - y_i)^2$$

# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 1: $f(x) = b_1 x$

$$D(b_1) = \sum_{k=1}^{n} (f(x_k) - y_k)^2$$
$$= \sum_{k=1}^{n} (b_1 x_k - y_k)^2$$
$$= \sum_{k=1}^{n} \left[b_1^2 x_k^2 - 2b_1 x_k y_k + y_k^2\right]$$
$$= b_1^2 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 - 2b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k y_k + \sum_{k=1}^{n} y_k^2$$

Qual a "cara" desta função?

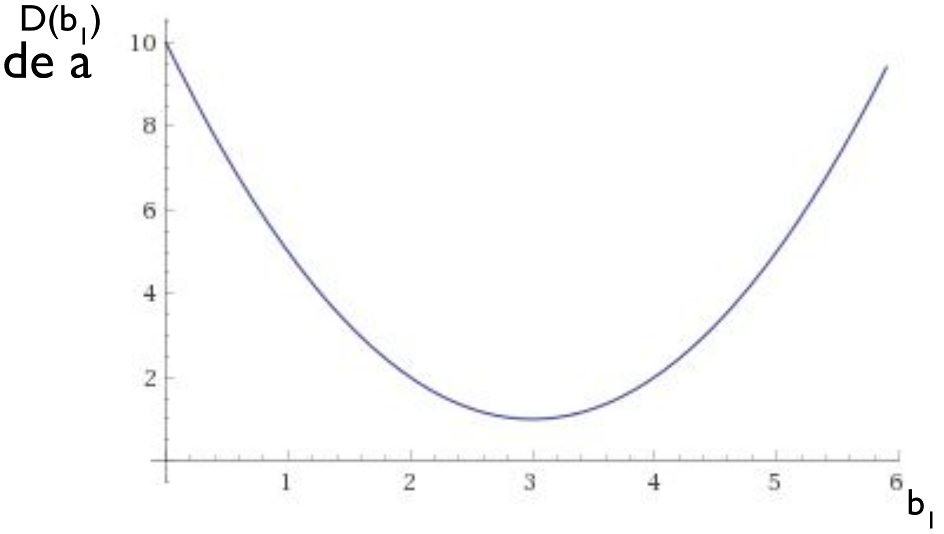


# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 1: $f(x) = b_1 x$

A função que queremos minimizar é $D(b_1) = b_1^2 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 - 2b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k y_k + \sum_{k=1}^{n} y_k^2$

Para isso, queremos encontrar $b_1$ onde a a derivada é nula.




$$\frac{dD}{db_1} = 2b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 - 2 \sum_{k=1}^{n} x_k y_k = 0$$

$$\Rightarrow b_1 = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_k y_k}{\sum_{k=1}^{n} x_k^2}$$

# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 2: $f(x) = b_0 + b_1x$

min $D(b_0,b_1)$, onde

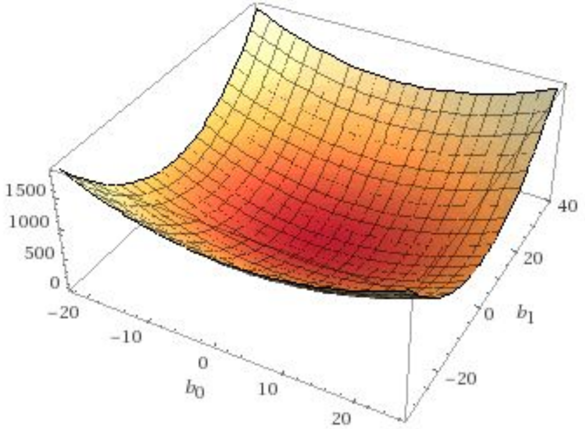
$$D(b_0, b_1) = \sum_{k=1}^{n} (f(x_k) - y_k)^2 = \sum_{k=1}^{n} (b_0 + b_1 x_k - y_k)^2$$

$$\frac{dD}{db_0} = \sum_{k=1}^{n} 2(\boxed{b_0 + b_1 x_k} - y_k) = 0$$

$$\Rightarrow b_0 \sum_{k=1}^{n} 1 + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k = \sum_{k=1}^{n} y_k$$

$$\frac{dD}{db_1} = \sum_{k=1}^{n} 2(b_0 + b_1 x_k - y_k)x_k = 0$$

$$\Rightarrow b_0 \sum_{k=1}^{n} x_k + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 = \sum_{k=1}^{n} y_k x_k$$



# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 2: $f(x) = b_0 + b_1x$

$$b_0 n + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k = \sum_{k=1}^{n} y_k$$

$$b_0 \sum_{k=1}^{n} x_k + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 = \sum_{k=1}^{n} y_k x_k$$

Como encontrar $b_0$ e $b_1$?

# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 2: $f(x) = b_0 + b_1 x$

Como encontrar $b_0$ e $b_1$?

$$b_0 n + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k = \sum_{k=1}^{n} y_k$$

$$b_0 \sum_{k=1}^{n} x_k + b_1 \sum_{k=1}^{n} x_k^2 = \sum_{k=1}^{n} y_k x_k$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$

# Método dos quadrados mínimos

Exemplo 3: $f(x) = b_0 e^{b_1 x}$

Dá origem a um sistema de equações não-lineares

$$D(b_0, b_1) = \sum_{i=1}^{n} (b_0 e^{b_1 x_i} - y_i)^2$$

$$\frac{\partial D}{\partial b_0} = \sum_{i=1}^{n} 2(b_0 e^{b_1 x} - y_i) e^{b_1 x} = 0$$

$$\frac{\partial D}{\partial b_1} = \sum_{i=1}^{n} 2(b_0 e^{b_1 x} - y_i) b_0 b_1 e^{b_1 x} = 0$$

# Generalizando

Relacionamos $x \in R$ com $y \in R$ através de $f(x)$. Chamamos:

- $x$ de **preditor** ou variável independente
- $y$ de **resposta** ou variável dependente

No caso geral, podemos ter um conjunto de preditores representado por um vetor $\mathbf{x}_i=[x_{i1},x_{i2},...,x_{in}]$. Assim, $f(x)$: $R^n \rightarrow R$.

Exemplo: imóveis $(\mathbf{x}_i,y_i)$, onde $x_i$ = [num_quartos$_i$, area$_i$], $y$ = preço$_i$

$f(x) = b_0 + b_1x_{i1}+b_2x_{i2}$

# Método dos quadrados mínimos

Podemos escolher outras funções também. Quando estas funções são lineares nos parâmetros $b_0$, $b_1$, …, $b_p$, o MQM dá origem a um sistema de equações lineares.

Quiz: funções lineares nos parâmetros?

# Aula anterior

- Regressão Linear
  - Simples
  - Múltipla
    - Polinomial
- Estimando coeficientes da regressão linear pelo MQM

# Aula de hoje

- Linearização
- Complexidade do MQM
- Condicionamento de $X^T X$
- Obtendo estimadores de quadrados mínimos sem construir equações normais
  - Decomposição QR
- Visão geral do conteúdo da Prova 2

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) =$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \leadsto \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \leadsto$$

$$y = ae^{bx} \leadsto$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \leadsto$$

$$y = ax_1^b x_2^c \leadsto \log_e(y) =$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \leadsto$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \leadsto$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) =$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \leadsto \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \leadsto \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \leadsto \log_e(y) = \log_e(a) + bx;$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \leadsto$$

$$y = ax_1^b x_2^c \leadsto \log_e(y) =$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \leadsto$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \leadsto$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + bx;$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow \log_e(y) = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) =$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + bx;$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow \log_e(y) = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x_1) + c\log_e(x_2)$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + bx;$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow \log_e(y) = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x_1) + c\log_e(x_2)$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow \frac{1}{y} = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow$$

# Linearização

Alguns modelos não-lineares nos parâmetros podem ser transformados em modelos lineares

$$y = ax^b \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x);$$

$$y = ab^x \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + \log_e(b)x;$$

$$y = ae^{bx} \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + bx;$$

$$y = e^{a+bx_1+cx_2} \rightsquigarrow \log_e(y) = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = ax_1^b x_2^c \rightsquigarrow \log_e(y) = \log_e(a) + b\log_e(x_1) + c\log_e(x_2)$$

$$y = \frac{1}{a + bx_1 + cx_2} \rightsquigarrow \frac{1}{y} = a + bx_1 + cx_2;$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}} \rightsquigarrow \log_e\left(\frac{1}{y} - 1\right) = a + bx_1 + cx_2.$$

# Complexidade

A estimação dos parâmetros de uma regressão linear pelo método que vimos em sala requer dois passos:

1. Construção das **equações normais** $X^T X \beta = X^T y$
2. Solução do sistema

Qual o custo de cada uma dessas etapas?

# Custo de construção das equações normais

Sejam:

p: # parâmetros

n: # observações

A matriz $X^TX$ é (p x p). O cálculo de cada entrada da matriz requer n adições e n multiplicações. Logo, o custo total é $\Theta(p^2n)$.

Note que o custo cresce linearmente no número de observações.

# Custo de solução das equações normais

Quando as colunas de X são LI, $X^T X$ é simétrica e definida positiva. Uma possibilidade seria resolver por Cholesky, cujo custo é $\Theta(p^3)$.

Em geral, n > p e, portanto, o custo de construção e solução somados são $\Theta(p^3+p^2n) = \Theta(p^2n)$.

Normalmente, o problema deste método não é o custo computacional, mas sim o condicionamento de $X^T X$.

# Condicionamento de $X^\top X$

Considere o número de condição segundo a norma-2.

$$\kappa(X^\top X) = \frac{\lambda_{\max}(X^\top X)}{\lambda_{\min}(X^\top X)}$$

# Condicionamento de $X^{\top}X$

Considere o número de condição segundo a norma-2.

$$\kappa(X^\top X) = \frac{\lambda_{\max}(X^\top X)}{\lambda_{\min}(X^\top X)}$$

$$\lambda_{\max}(X^\top X) = \sigma^2_{\max}(X) \quad \text{e} \quad \lambda_{\min}(X^\top X) = \sigma^2_{\min}(X)$$

$$\kappa(X^\top X) = \left(\frac{\sigma_{\max}(X)}{\sigma_{\min}(X)}\right)^2$$

# Condicionamento de $X^TX$

Considere o número de condição segundo a norma-2.

$$\kappa(X^\top X) = \frac{\lambda_{\max}(X^\top X)}{\lambda_{\min}(X^\top X)}$$

$$\lambda_{\max}(X^\top X) = \sigma^2_{\max}(X) \quad \text{e} \quad \lambda_{\min}(X^\top X) = \sigma^2_{\min}(X)$$

$$\kappa(X^\top X) = \left(\frac{\sigma_{\max}(X)}{\sigma_{\min}(X)}\right)^2$$

Ex..: Quando $k(X)=10^3$, $k(X^TX)=10^6$