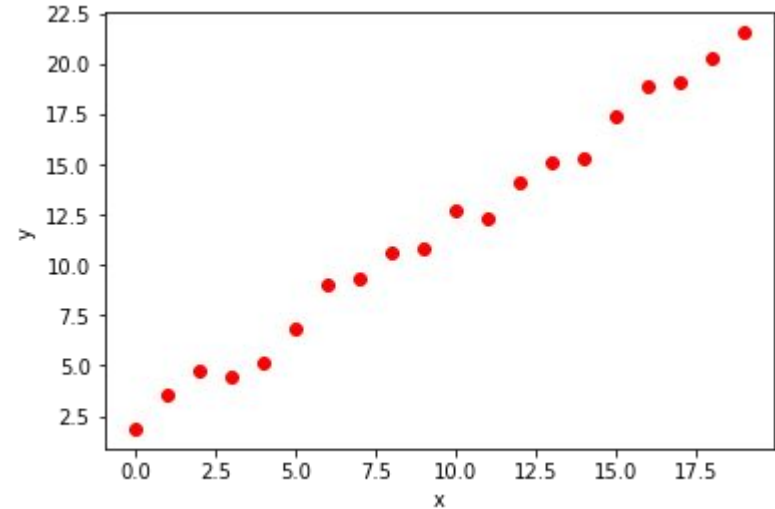


Ajuste de Curvas (e em particular, Regressão Linear)

Fabricio Murai

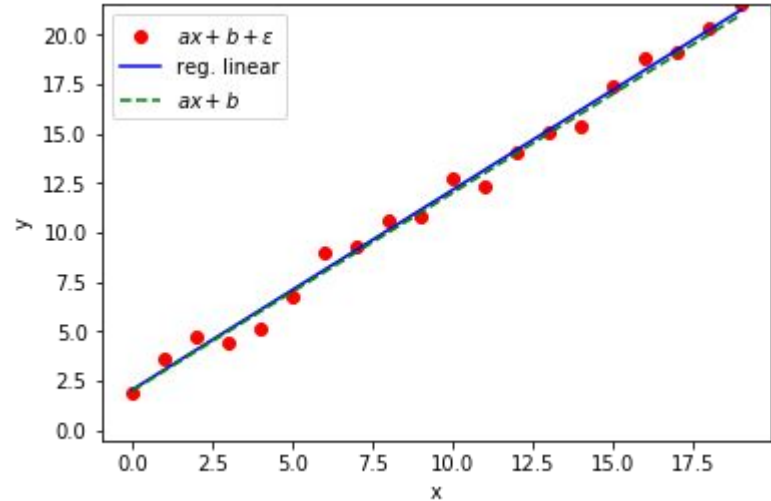
Exemplo de ajuste de curva

- 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?



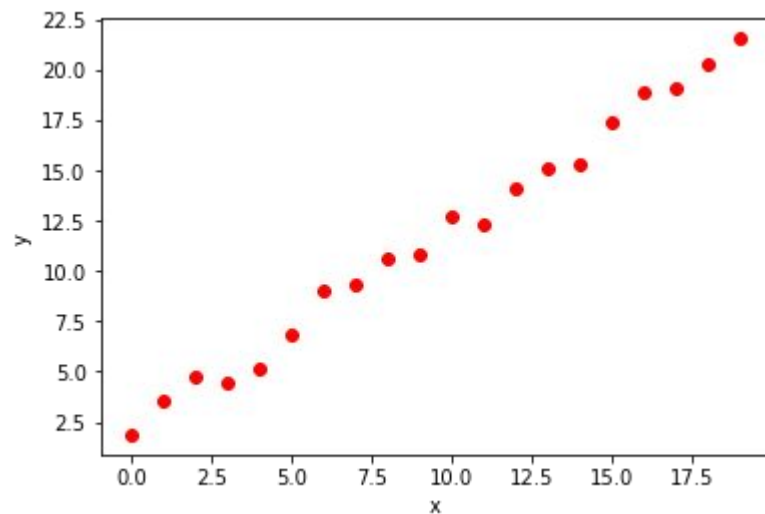
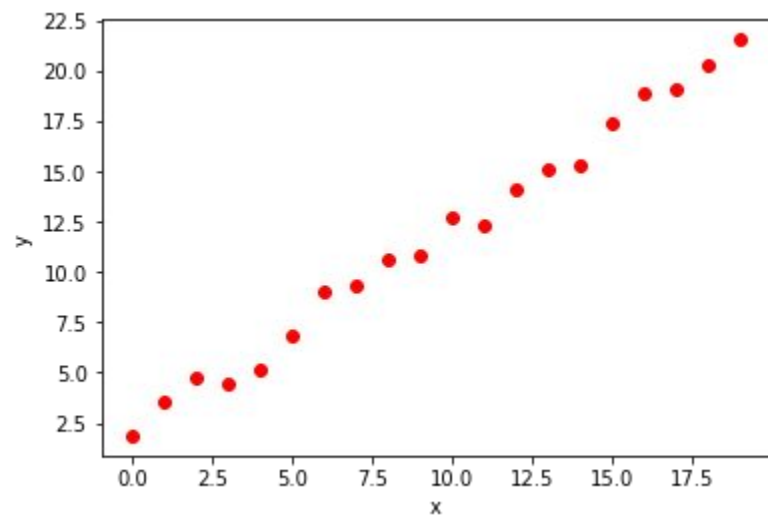
Como medir a qualidade em um ponto?

Qualidade do ajuste

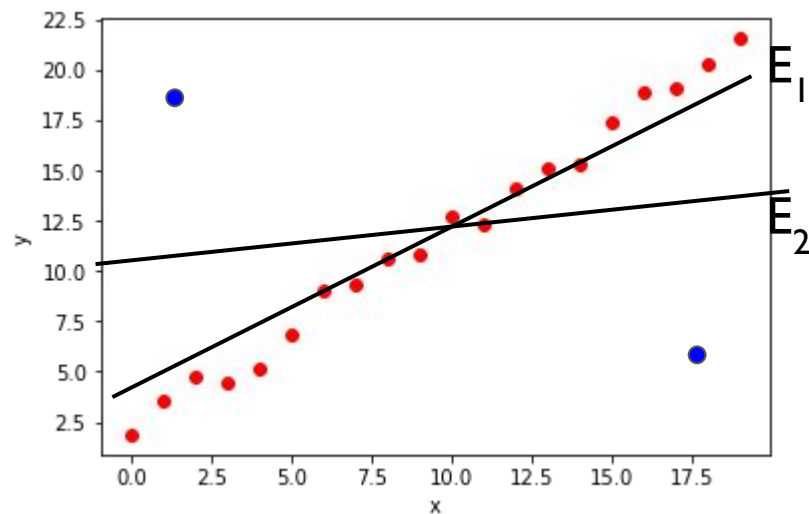
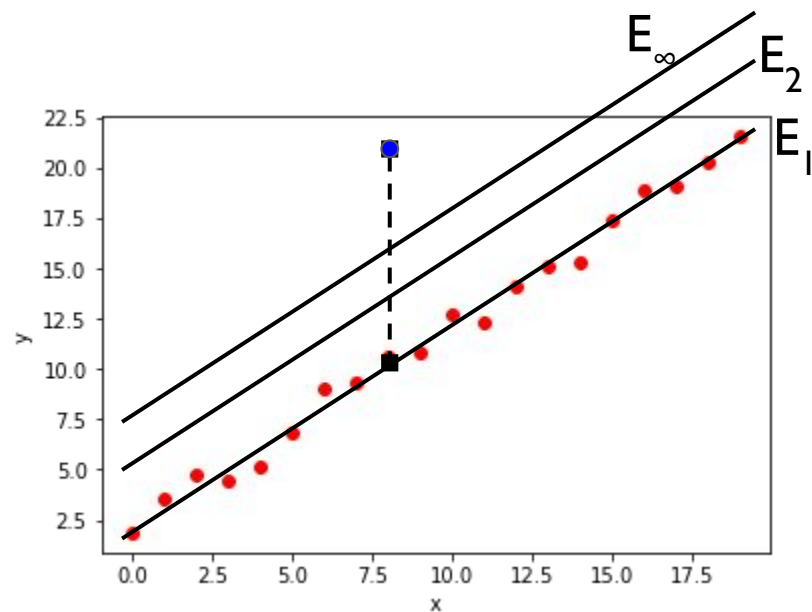
Exemplos de métricas levando em consideração pontos (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , ..., (x_n, y_n) :

1. Erro máximo
2. Erro médio (Erro L_1)
3. Raiz do erro quadrático médio (Erro L_2)

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



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

Isto é equivalente a minimizar

Método dos quadrados mínimos

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

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

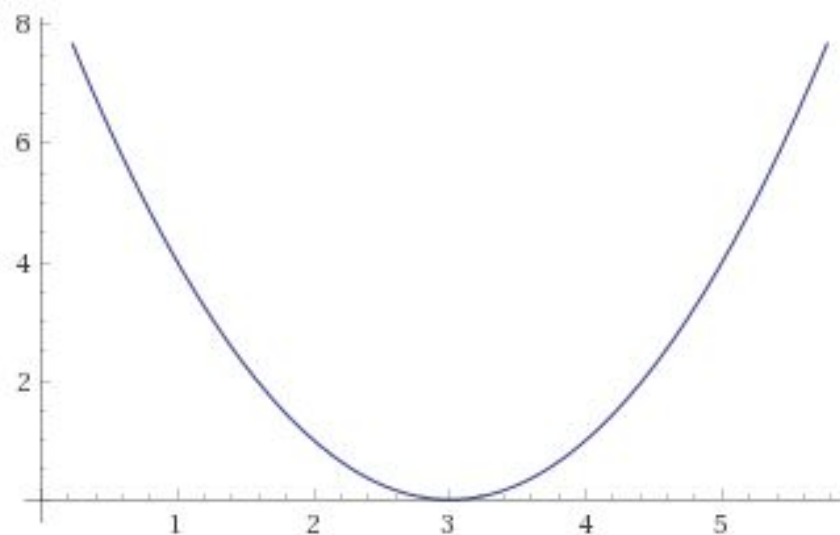
Qual a "cara"
desta função?

Método dos quadrados mínimos

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

$$\begin{aligned} D(b_1) &= \sum_{k=1}^n (f(x_k) - y_k)^2 \\ &= \sum_{k=1}^n (b_1 x_k - y_k)^2 \\ &= \sum_{k=1}^n [b_1^2 x_k^2 - 2b_1 x_k y_k + y_k^2] \\ &= b_1^2 \sum_{k=1}^n x_k^2 - 2b_1 \sum_{k=1}^n x_k y_k + \sum_{k=1}^n y_k^2 \end{aligned}$$

Qual a "cara"
desta função?

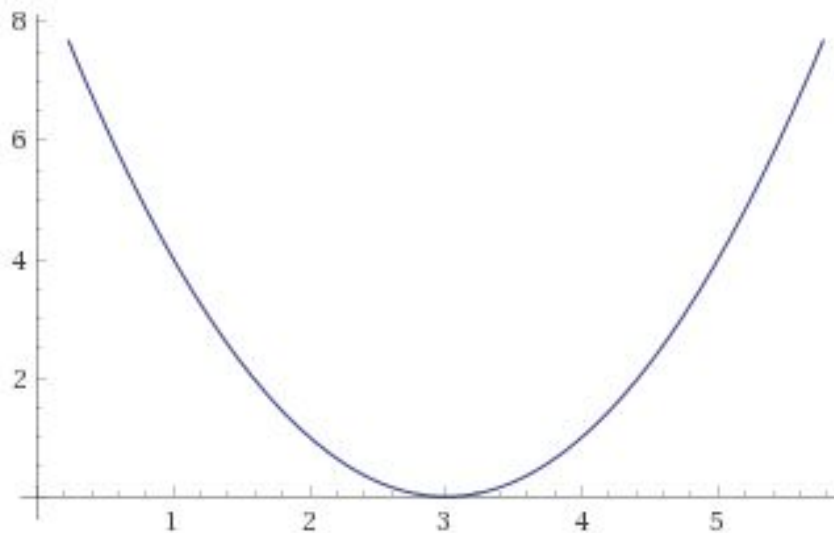


Método dos quadrados mínimos

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 derivada é nula.



Método dos quadrados mínimos

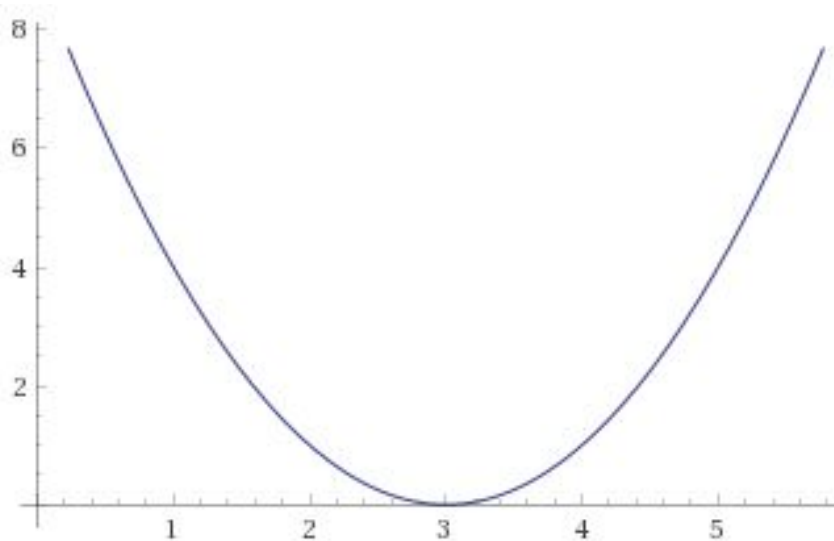
Exemplo 1: $f(x) = b_1 x$

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 derivada é nula.

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

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

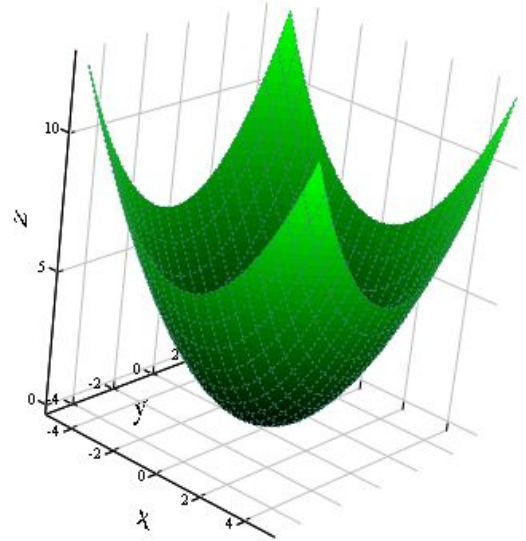


Método dos quadrados mínimos

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

$\min D(b_0, b_1)$, onde

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



Método dos quadrados mínimos

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

$\min D(b_0, b_1)$, onde

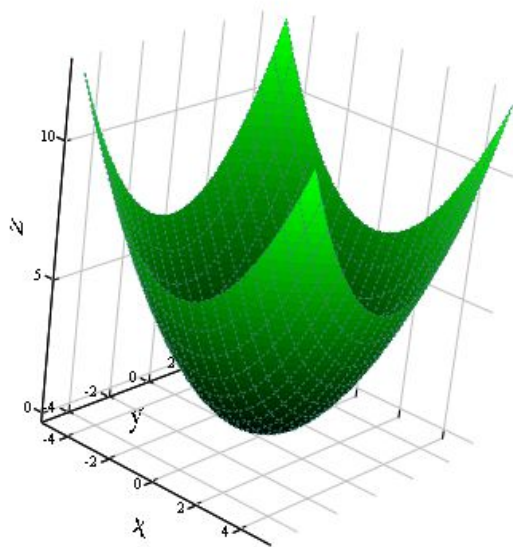
$$D(b_0, b_1) = \sum_{k=1}^n (f(x_k) - y_k)^2 = \sum_{k=1}^n (b_0 + b_1 x_k - y_k)^2$$

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

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

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

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



Método dos quadrados mínimos

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

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

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

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

Generalizando

Relacionamos $x \in \mathbb{R}$ com $y \in \mathbb{R}$ 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 $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in}]$. Assim, $f(\mathbf{x}): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Exemplo: imóveis (\mathbf{x}_i, y_i) , onde $\mathbf{x}_i = [\text{num_quartos}_i, \text{area}_i]$, $y = \text{preço}_i$
$$f(\mathbf{x}) = b_0 + b_1 x_{i1} + b_2 x_{i2}$$

Método dos quadrados mínimos

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

Quiz: funções lineares nos parâmetros?

Regressão Linear Simples