Métodos Numéricos I

Tema 4. Ajuste de Curvas. Mínimos Quadrados.

Prof. Dany S. Dominguez
dsdominguez@gmail.br
Sala 1 – NBCGIB
(73) 3680 5212 – ramal 30

ROTEIRO

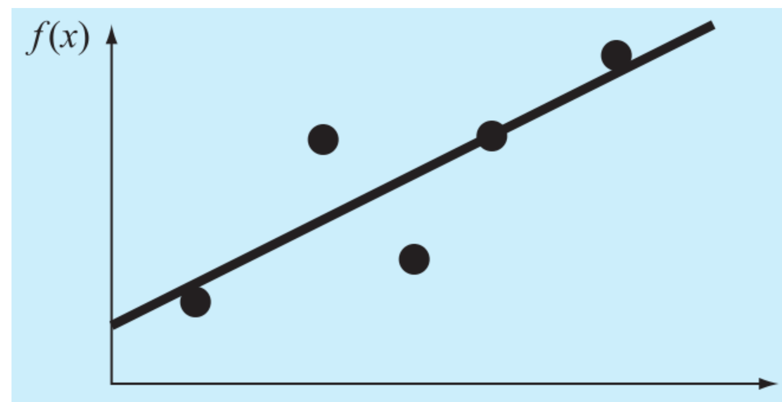
- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Problemas em ajuste de curvas

- Conjunto de valores discretos
  - Os dados são conhecidos em um conjunto discreto de valores
  - Deseja-se conhecer valores em pontos que não pertencem ao conjunto
  - Devemos obter uma função (modelo) que descreva o comportamento dos dados
- Funções complexas
  - Temos uma função de alto custo computacional, derivadas desconhecidas ou de alto custo, não integrável
  - Avaliamos a função em pontos do intervalo de interesse
  - Obtemos uma função mais simples que descreva os dados

Abordagens

- A abordagem utilizada no ajuste depende da incerteza (ou erro) presente nos dados
- Regressão por mínimos quadrados
  - Dados apresentam grau significativo de erros (ruído)
  - Isto ocorre geralmente com dados experimentais
  - Procura-se uma curva que represente a tendência geral dos dados
  - Os pontos individuais não precisam satisfazer a função encontrada

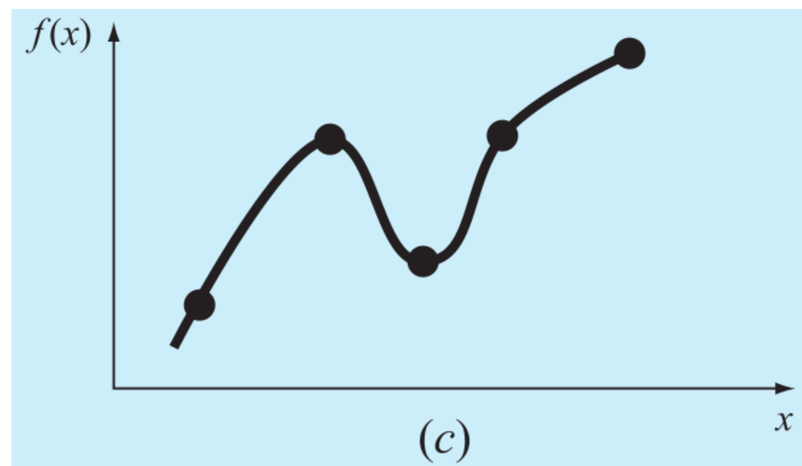


(a)

Abordagens

- Interpolação
  - Os dados disponíveis são muito precisos
  - Dados produto de analises estatísticas ou gerados por uma função
  - Encontrar uma função (ou várias funções) que satisfaçam cada um dos pontos
  - Chamamos interpolação à estimativa entre pontos discretos

- Chamamos extrapolação o cálculo de estimativas fora do intervalo de dados
- O uso de modelos na condição de extrapolação deve ser feito cuidadosamente

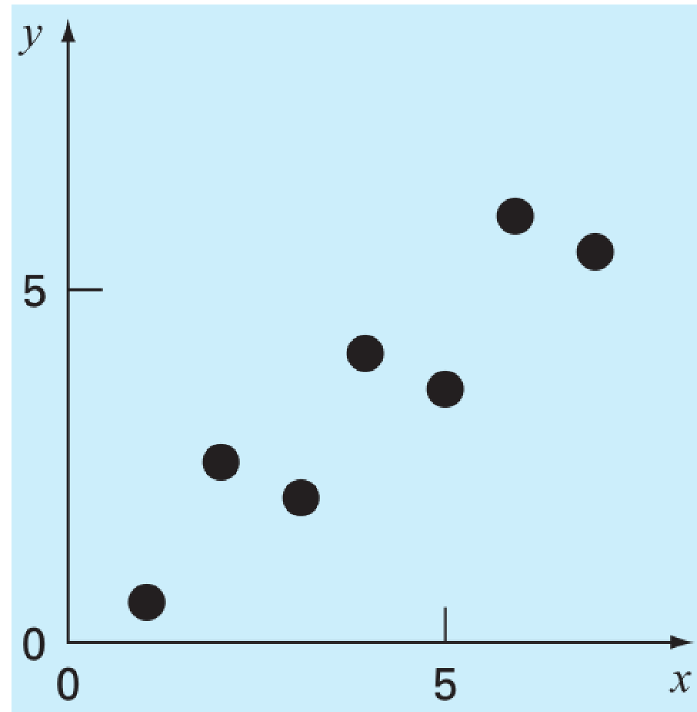


Aplicações ajuste de curvas

- Análise de tendências
  - Previsão de valores da variável de dependente
- Teste de hipótese
  - Encontrar ou validar um modelo para os dados
  - Geralmente envolve calcular os coeficientes do modelo
- Aproximação de funções complicadas

Regressão por mínimos quadrados

- Dado o seguinte conjunto de dados experimentais
- Os valores sugerem que a valores mais altos de x correspondem valores mais altos de y
- Função crescente
- Oscilações

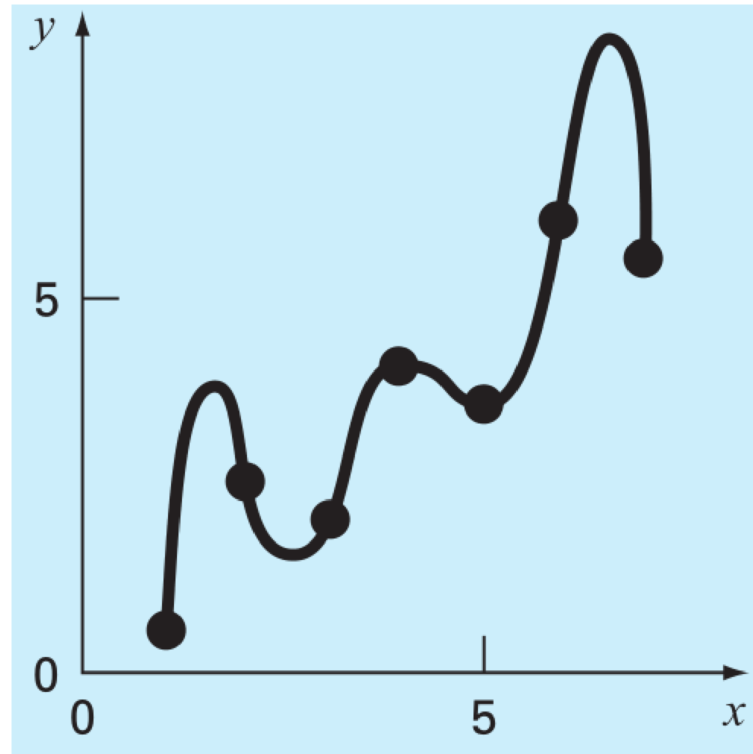


(a)

Regressão por mínimos quadrados

- Podemos ajustar os dados utilizando interpolação polinomial

- O polinômio interpolador passa exatamente por todos os pontos
- Os valores interpolados entre 5,5 e 6 não correspondem aos dados
- Motivos:
  - Elevado grau do polinômio
  - Incerteza nos dados

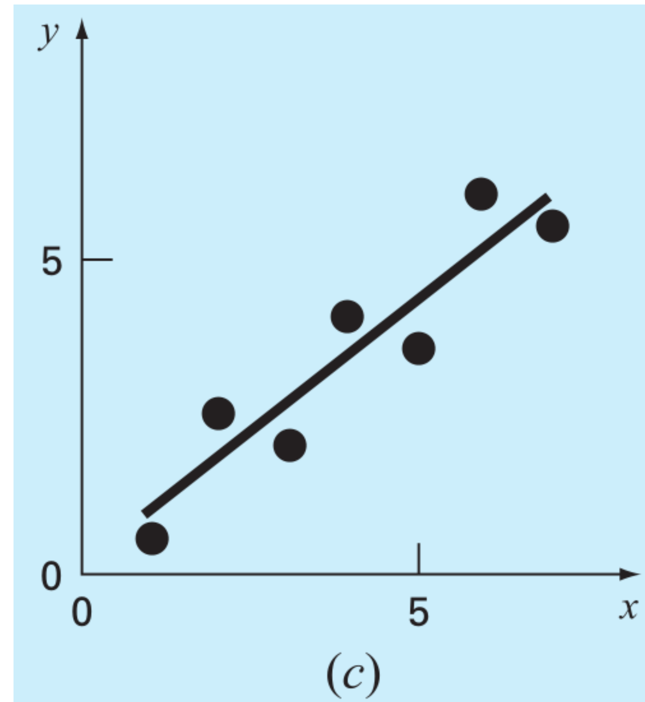


(b)

Regressão por mínimos quadrados

- Outra estratégia é encontrar uma função aproximada que ajuste a tendência geral dos dados

- A reta não satisfaz exatamente o conjunto de dados
- Reproduz o comportamento na região de interesse
- Como determinar a função de ajuste?



- **Regressão por MQ**: visa determinar uma curva que minimize as discrepâncias entre os dados e os pontos da curva.

ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Regressão linear

- A alternativa mais simples de regressão por MQ é a regressão linear
- Problema: Ajustar o conjunto de pontos (x_1, y_1), $(x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ a reta

$$y = a_0 + a_1 x + e$$

  - a_0, coeficiente de interseção
  - a_1, pendente ou inclinação da reta
  - e, erro ou resíduo
- Resíduo: discrepância entre o valor verdadeiro (y) e o valor aproximado pela reta

$$e = y - a_0 - a_1 x$$

Regressão linear

- Qual critério podemos utilizar para minimizar o resíduo e obter uma função de ajuste única?

1. Minimizar a soma dos erros para todos os pontos disponíveis

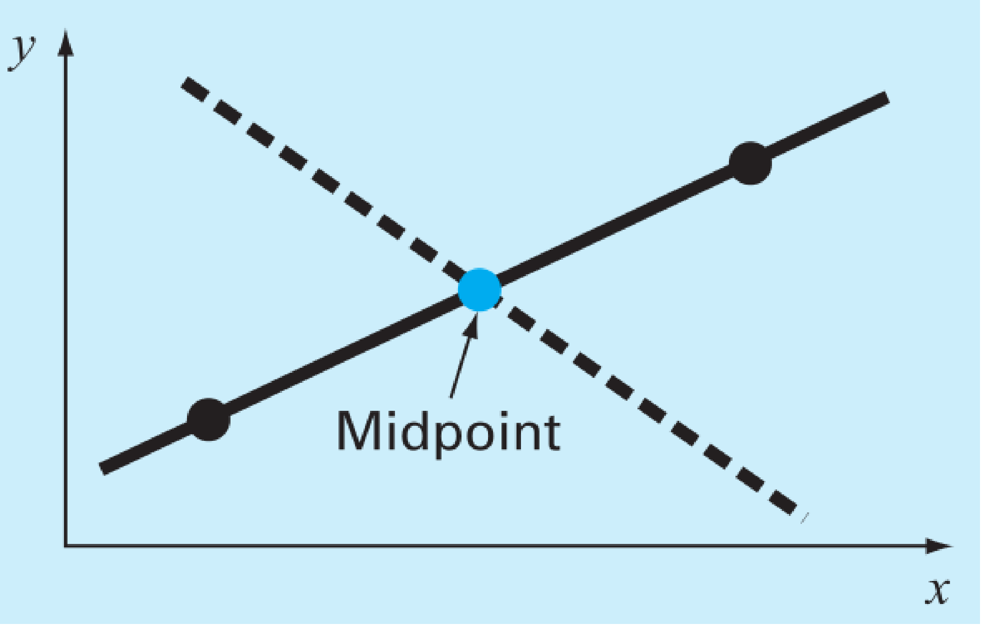
$$\sum_{i=1}^{n} e_i = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) \quad (1)$$

   – Considere o ajuste de uma reta a dois pontos
   – O melhor ajuste é a reta que une os dois pontos
   – Qualquer reta que passe pelo ponto médio do segmento que liga os pontos resulta no valor mínimo da eq. (1)
   – Os erros de sinais diferentes cancelam-se

Regressão linear

- Como minimizar o resíduo . . .

1. Minimizar a soma dos erros . . .



   – Infinitas soluções
   – Alguns ajustes não representam os dados

- Como evitar o cancelamento dos resíduos?

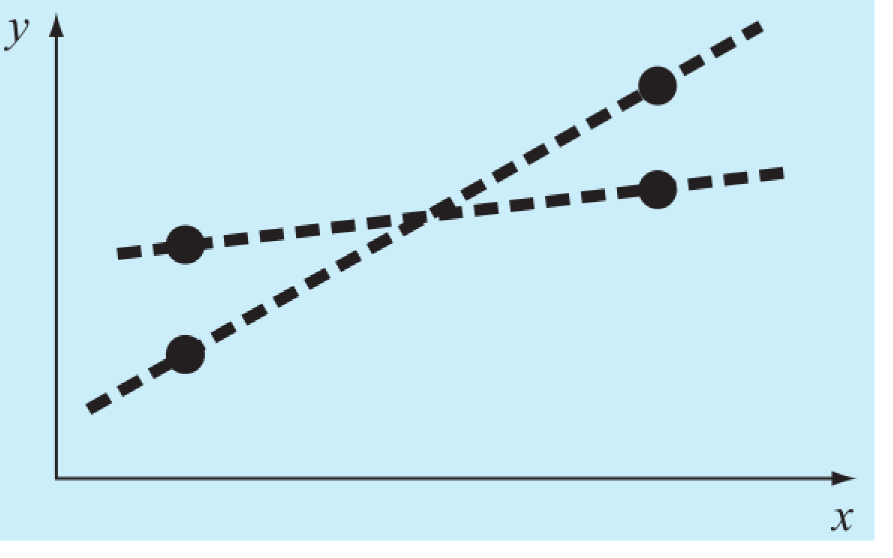
Regressão linear

- Como minimizar o resíduo . . .

2. Minimizar a soma dos valores absolutos das discrepâncias

$$\sum_{i=1}^{n} |e_i| = \sum_{i=1}^{n} |y_i - a_0 - a_1 x_i| \quad (2)$$

   – Considere o ajuste de uma reta a 4 pontos
   – Qualquer reta passando entre as retas tracejadas minimiza a eq. (2)
   – Infinitas soluções



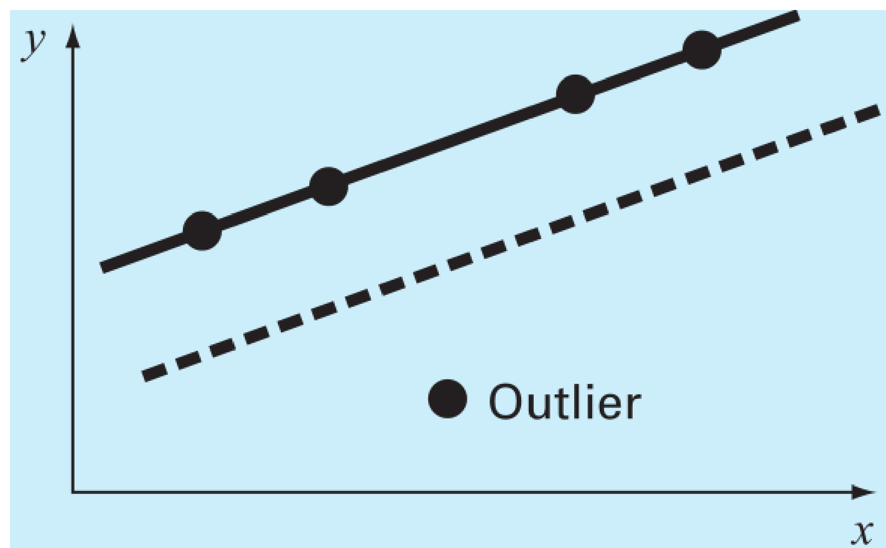
Regressão linear

- Como minimizar o resíduo . . .

3. Critério minimax: escolher a reta que minimize a distância máxima que um ponto individual tenha com a reta de ajuste

$$\min_{(reta)}\left[\max_{i=1:n}\left|e_i\right|\right] \quad (3)$$

   - Amplifica a influência de pontos com elevada incerteza
   - Melhor (linha continua)
   - Minimax (linha tracejada)



Regressão linear

- Como minimizar o resíduo . . .

4. Minimizar a soma do quadrado dos resíduos

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i,dados} - y_{i,\text{modelo}} \right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right)^2 \quad (4)$$

   - S_r soma do quadrado dos resíduos
   - Este critério fornece um ajuste único
   - O erro de ajuste é minimizado para todos os pontos

- Como determinar os valores de a_0 e a_1 que minimizem a eq. (4)?

Regressão linear

- Derivamos a eq. (4) em relação a cada coeficiente

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum\left[\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)x_i\right]$$

- Para simplificar a notação $\sum \Rightarrow \sum_{i=1}^{n}$
- Para obter o mínimo de S_r igualamos as derivadas a zero

$$0 = \sum y_i - \sum a_0 - a_1 \sum x_i$$

$$0 = \sum y_i x_i - a_0 \sum x_i - a_1 \sum x_i^2$$

Regressão linear

- Escrevemos as eqs anteriores como um SELA com incógnitas a_0 e a_1

$$(n)a_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 = \sum y_i x_i$$

- Resolvendo obtemos as expressões para calcular os coeficientes

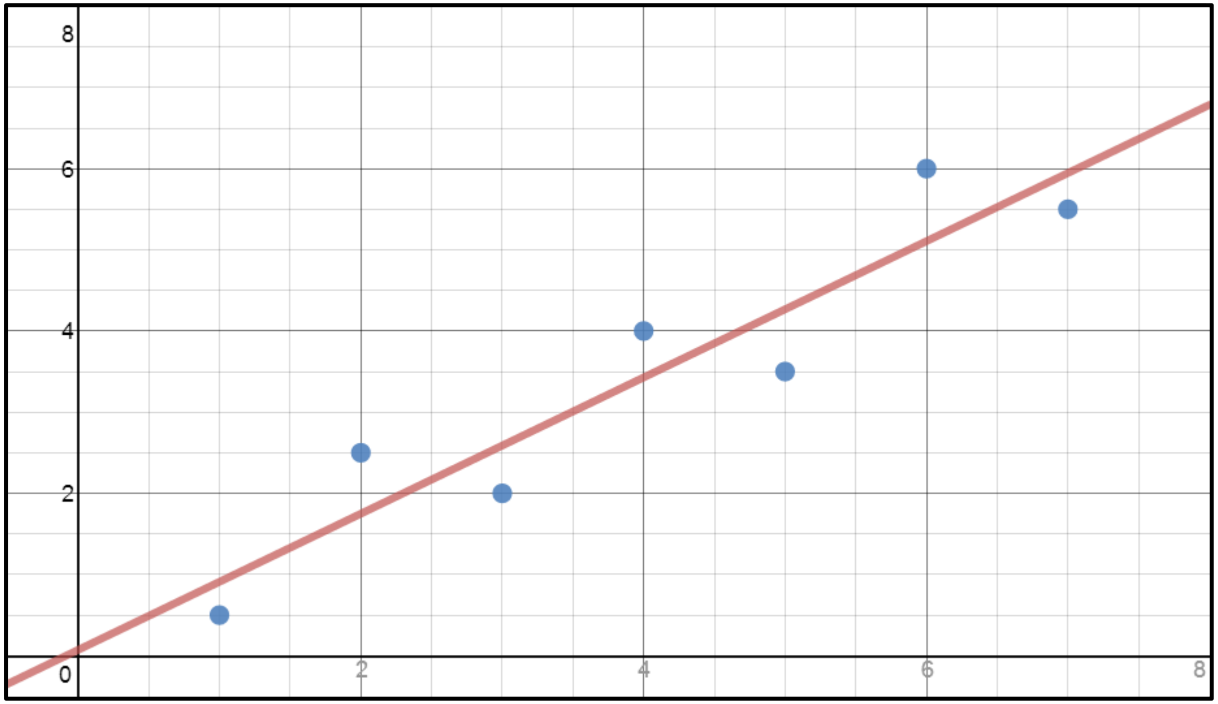
$$a_0 = \frac{\sum y_i - a_1 \sum x_i}{n} = \bar{y} - a_1 \bar{x} \quad (5)$$

$$a_1 = \frac{n\sum (y_i x_i) - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2} \quad (6)$$

Regressão linear

- **Exemplo 1**: Ajuste uma reta aos valores (x, y) da tabela abaixo

x_i	y_i
1,00	0,50
2,00	2,50
3,00	2,00
4,00	4,00
5,00	3,50
6,00	6,00
7,00	5,50



- Arquivo Excel

$$n = 7$$

$$a_1 = 0,83929 \quad a_0 = 0,07143 \qquad y = 0,07143 + 0,83929x$$

Regressão linear

- Como quantificar o erro da reta de ajuste?
- Da estatística básica, a soma total dos quadrados dos resíduos em relação à media, é definida por

$$S_t = \sum \left(y_i - \bar{y} \right)^2 \qquad (7)$$

- Na regressão linear temos

$$S_r = \sum \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right)^2 \qquad (8)$$

- A eq. (7) caracteriza o erro residual em relação ao valor médio do conjunto, antes da regressão
- A eq. (8) caracteriza o erro residual em relação à reta de ajuste, depois da regressão

Regressão linear

- A diferença $(S_t\text{-}S_r)$ quantifica a redução do erro decorrente de descrever os dados usando uma reta e não o valor médio,
- Definimos então:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

  - r^2 coeficiente de determinação
  - r coeficiente de correlação

- Quais valores de r descrevem um ajuste perfeito (ruim)?

Regressão linear

- Ajuste perfeito
  - $S_r = 0, r^2 = r = 1$
  - A reta reproduz perfeitamente o comportamento dos dados

- Ajuste ruim
  - $S_r = S_t, r^2 = r = 0$
  - A reta NÃO reproduz perfeitamente o comportamento dos dados
  - O ajuste não melhora a descrição dos dados em relação à média

Regressão linear

- **Exemplo 2**: Avalie a qualidade do ajuste para o exemplo 1
  - Arquivo Excel

$$\bar{y} = 3,4286$$

$$S_t = 22,714$$

$$S_r = 2,9911$$

$$r^2 = 0,8683$$

$$r = 0,9318$$

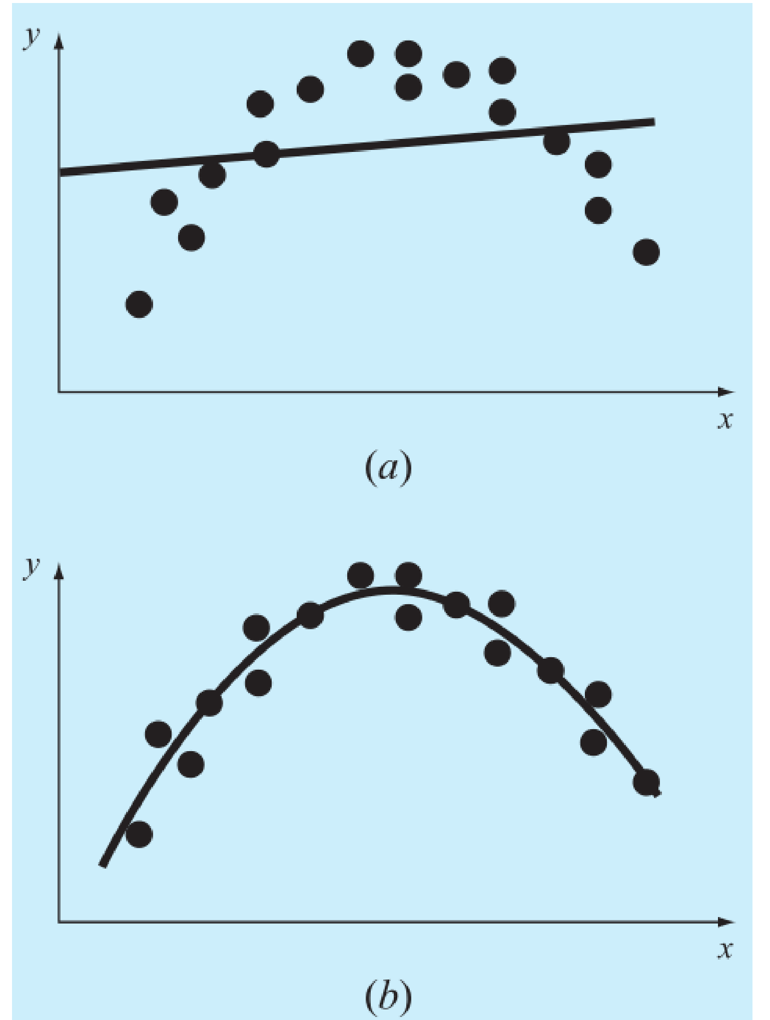
  - O ajuste obtido descreve apropriadamente os dados

ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Funções não-lineares

- A regressão linear oferece uma técnica simples para ajustar uma reta aos dados
- Pressupõe que a relação entre a variável dependente e a independente, é linear
- Alguns dados não tem dependência linear
- Nesses casos um ajuste curvilíneo é preferível
  - Regressão polinomial
  - Modelos não lineares



(a)

(b)

Funções não-lineares

- Em funções não-lineares que envolvam um ou dois parâmetros
- Podemos utilizar transformações para expressar a função em forma lineal
- Em seguida, aplicar a regressão linear
- Esta técnica é conhecida como linearização da função
- Vejamos alguns exemplos

Funções não-lineares

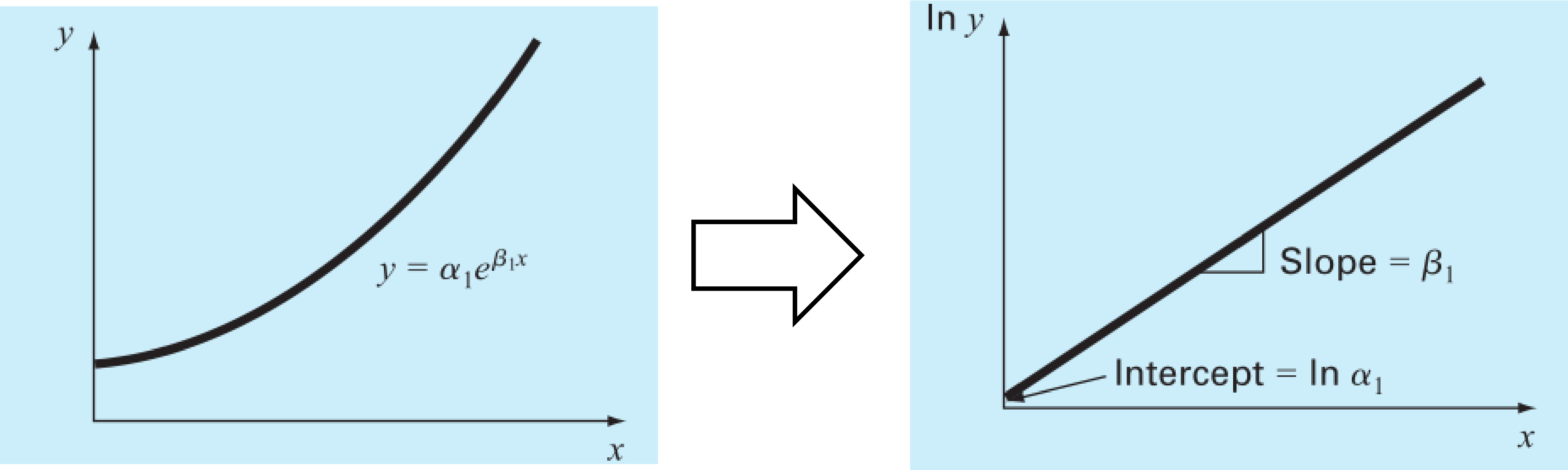
- Modelo exponencial $y = \alpha_1 e^{\beta_1 x}$
  - α_1, β_1 constantes (parâmetros do modelo)
  - Descreve fenômenos onde a variável dependente aumenta (ou diminui) proporcionalmente a seu valor absoluto
  - Exemplos:
    - Crescimento populacional
    - Decaimento radiativo
  - Para linearizar, aplicamos logaritmo natural

$$y^* = \ln \alpha_1 + \beta_1 x \qquad (9)$$

  - sendo $y^* = \ln y, \quad a_0 = \ln \alpha_1, \quad a_1 = \beta_1$

Funções não-lineares

- Modelo exponencial . . .



Funções não-lineares

- Equação de potencia simples $y = \alpha_2 x^{\beta_2}$
  - α_2, β_2 constantes
  - Exemplos:
    - Crescimento de cristais e polímeros
    - Reações químicas
  - Para linearizar, aplicamos logaritmo base 10

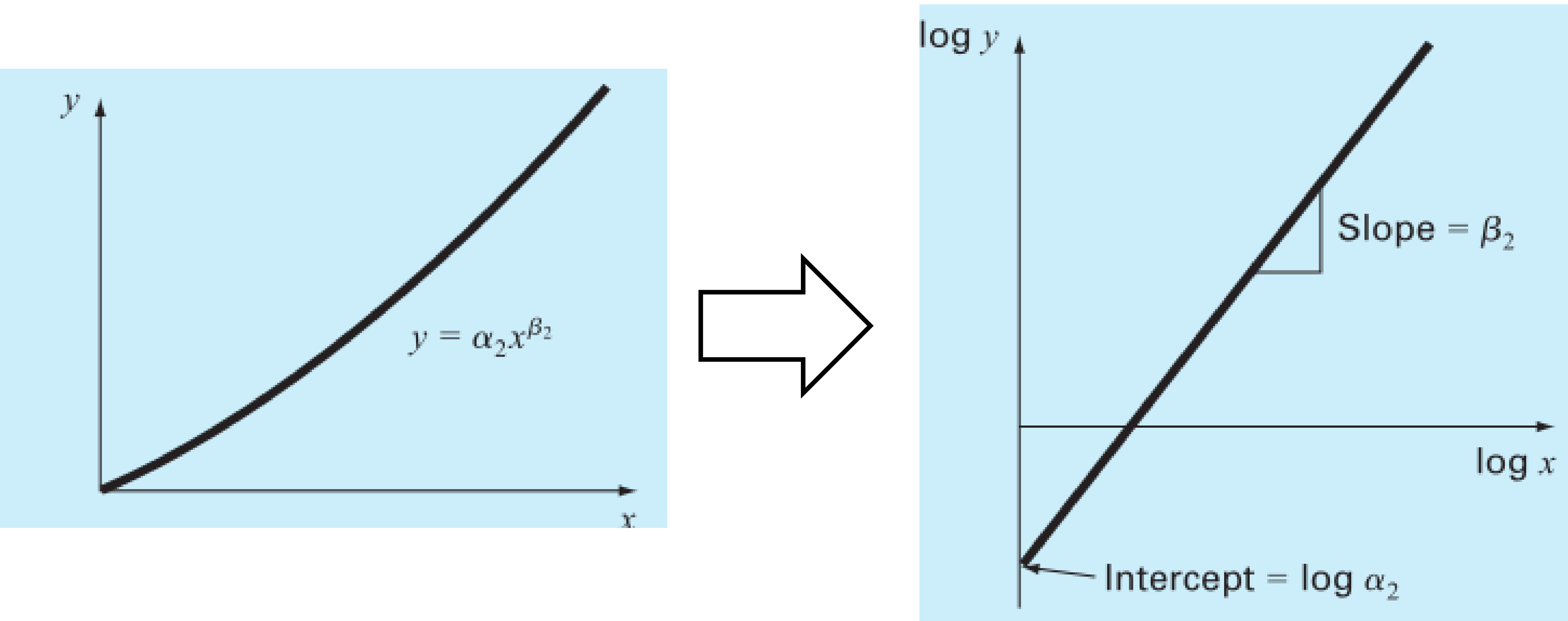
$$y^* = \log \alpha_2 + \beta_2 x^* \qquad (10)$$

  - sendo

$$y^* = \log y, \quad x^* = \log x, \quad a_0 = \log \alpha_2, \quad a_1 = \beta_2$$

Funções não-lineares

- Equação de potência simples. . .



Funções não-lineares

- Modelo de taxa de crescimento de saturação

$$y = \alpha_3 \frac{x}{\beta_3 + x}$$

  - α_3, β_3 constantes
  - Exemplos:
    - Crescimento populacional em condições limitantes
    - Reações químicas
  - Para linearizar, invertemos a equação

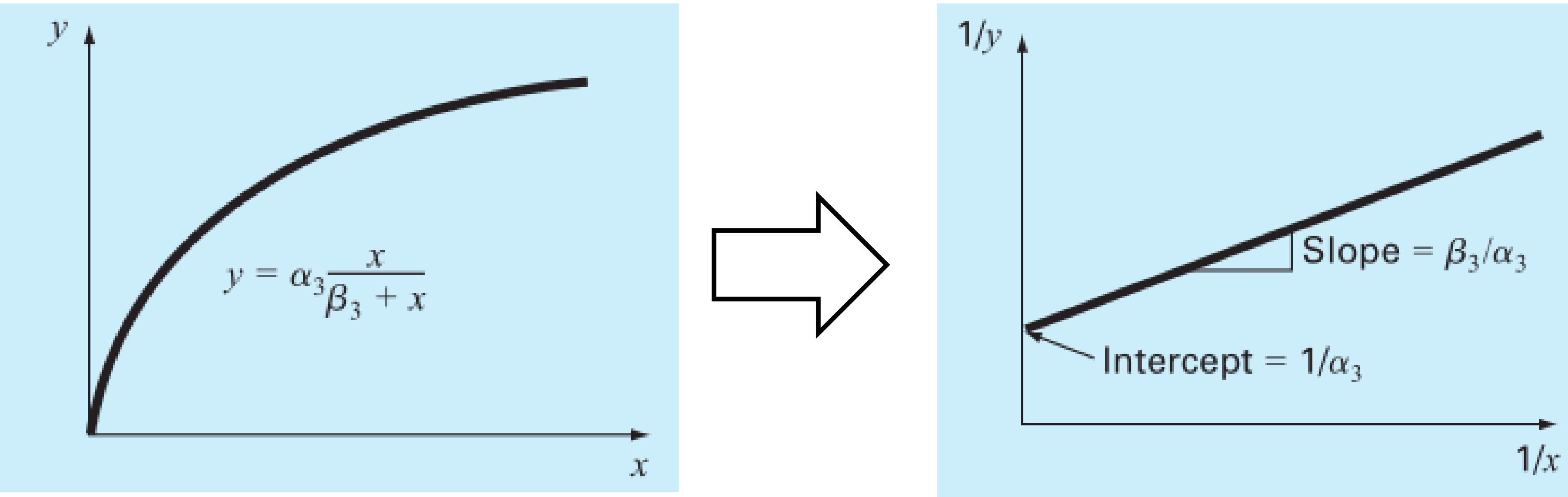
$$y^* = \frac{\beta_3}{\alpha_3} x^* + \frac{1}{\alpha_3} \qquad (11)$$

  - sendo

$$y^* = \frac{1}{y}, \quad x^* = \frac{1}{x}, \quad a_0 = \frac{1}{\alpha_3}, \quad a_1 = \frac{\beta_3}{\alpha_3}$$

Funções não-lineares

- Equação de crescimento com saturação. . .

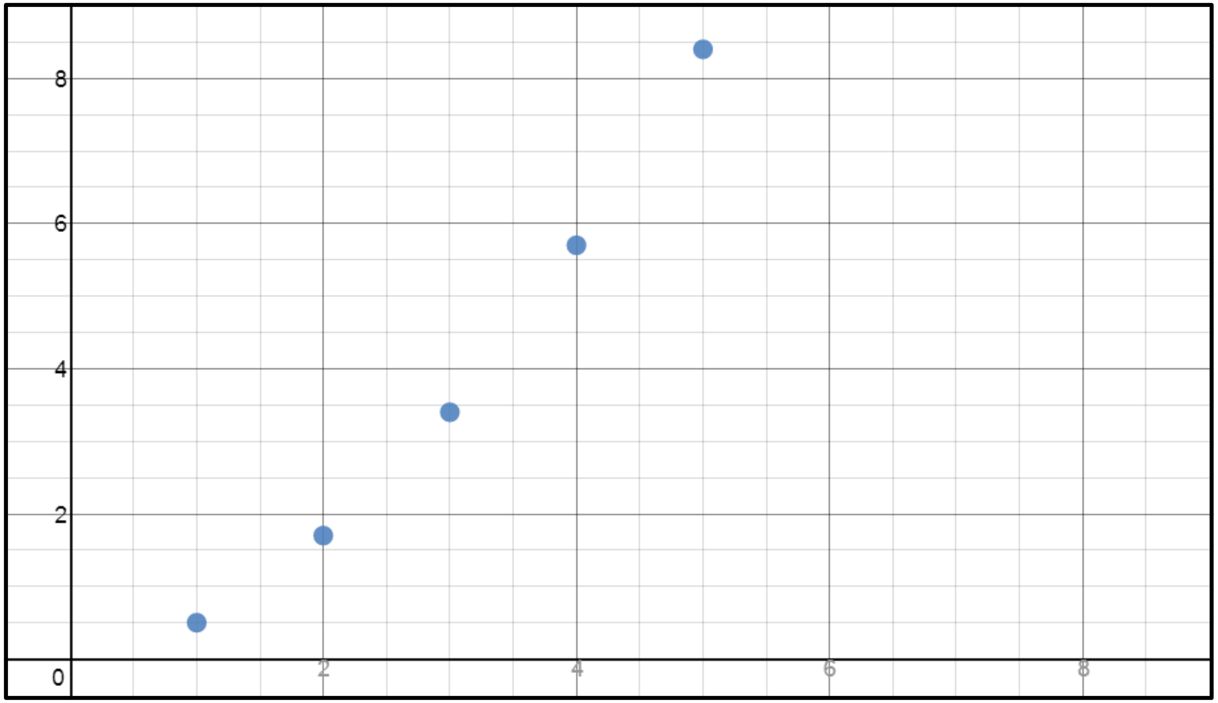


- Considerando os modelos transformados (eqs. (9, 10, 11)) podemos usar a regressão linear para calcular a_0 e a_1
- Depois, utilizamos a transformação inversa para determinar α e β

Funções não-lineares

- **Exemplo 3**: Considerando os dados da tabela abaixo obtenha um ajuste para a equação de potencia $y = \alpha x^{\beta}$

x_i	y_i
1,00	0,50
2,00	1,70
3,00	3,40
5,00	5,70
6,00	8,40



Funções não-lineares

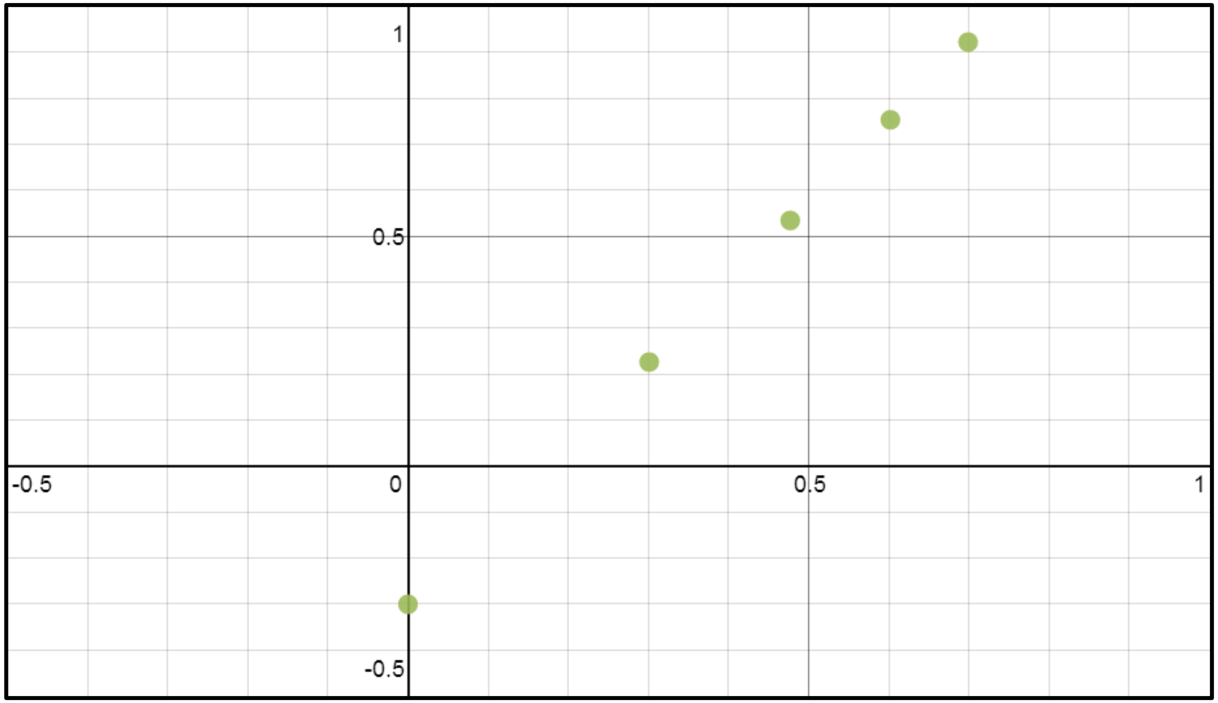
- **Exemplo 3** . . .
  - Modelo linearizado

$$y^* = \log \alpha + \beta x^* = a_0 + a_1 x$$

  - Transformações (Excel)

$$y^* = \log y, \quad x^* = \log x$$

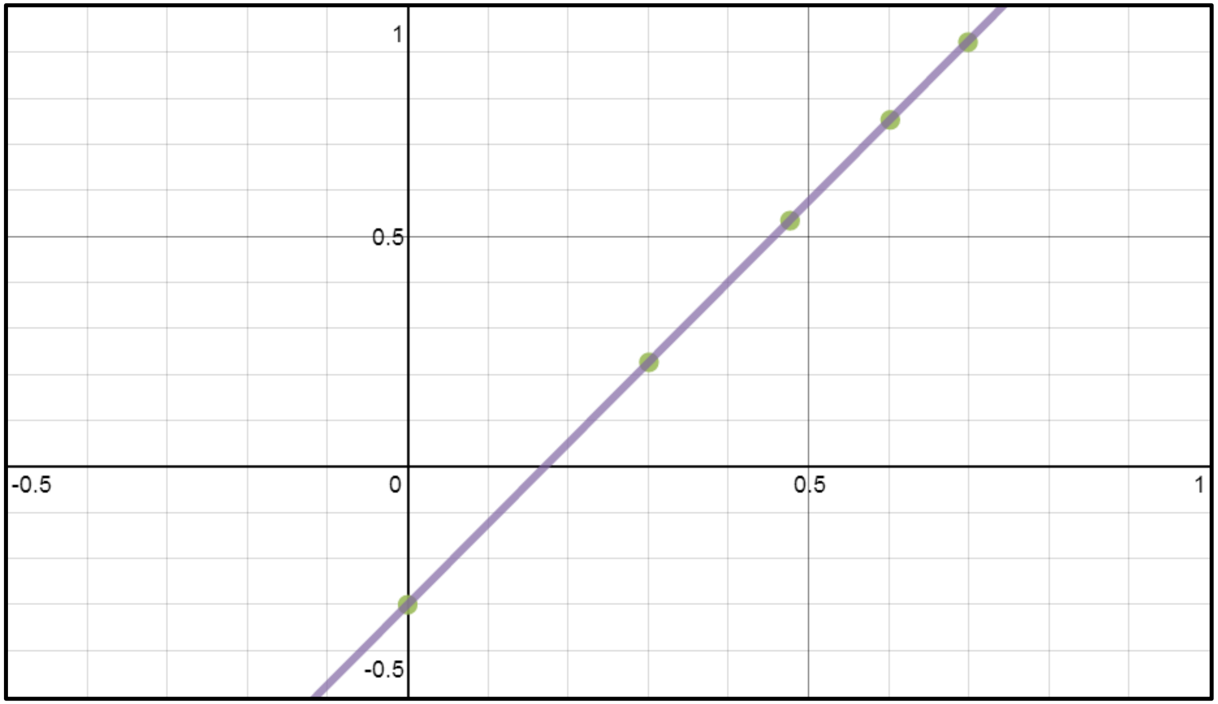
x_i	y_i
0,00	-0,30
0,30	0,23
0,48	0,53
0,70	0,76
0,78	0,92



Funções não-lineares

- **Exemplo 3** . . .
  - Aplicando regressão linear (Excel)

$$a_0 = -0,3002$$
$$a_1 = 1,7517$$



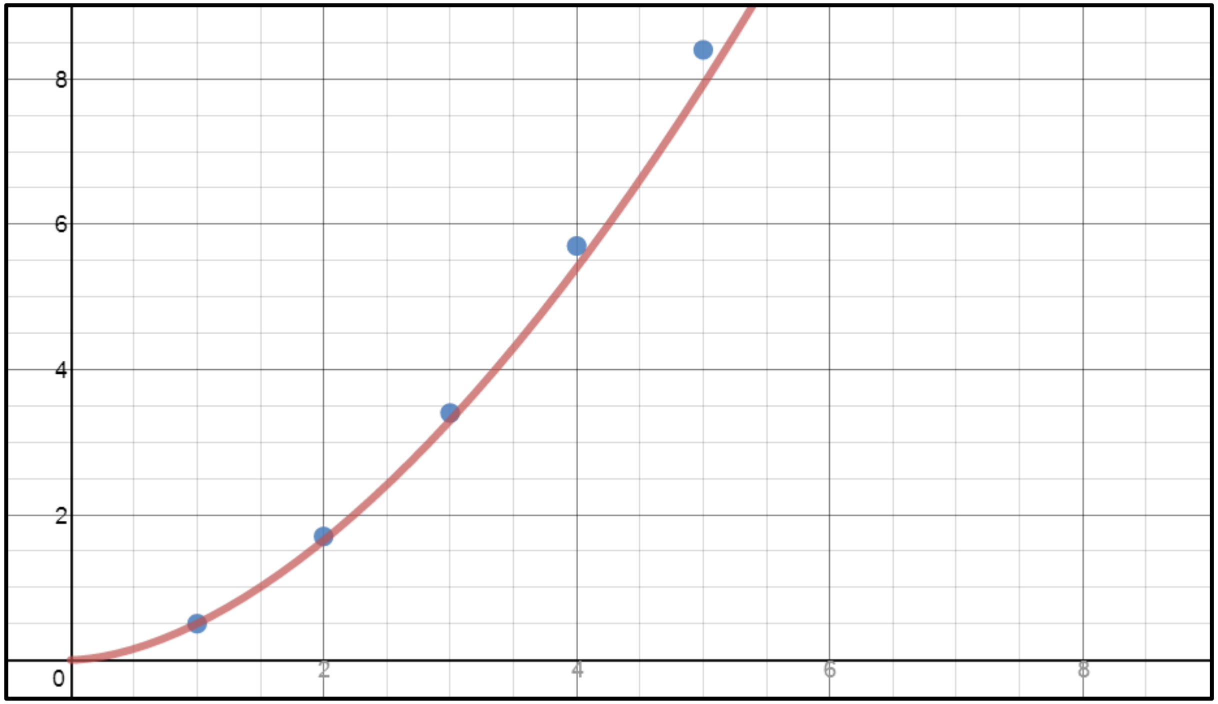
Funções não-lineares

- **Exemplo 3** . . .
  - Calculamos os parâmetros do modelo

$$\alpha = 10^{a_0} = 0,5009$$

$$\beta = 1,7517$$

$$y = 0,5009x^{1,7517}$$



ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Regressão polinomial

- Temos estudado procedimentos para ajustar dados a uma reta
- Muitos conjuntos de dados não são descritos de forma satisfatória por uma reta
- Nesses casos um ajuste *curvilíneo* deve ser utilizado
- Se desejarmos mais de dois parâmetros, obtemos esse tipo de ajuste utilizando a regressão polinomial
- O procedimento de mínimos quadrados pode ser estendido para polinômios de grau mais alto

Regressão polinomial

- Ilustramos o procedimento para o polinômio quadrático

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

- Considerando um conjunto de n pontos, a soma do quadrado dos resíduos aparece como

$$S_r = \sum e_i^2 = \sum \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right)^2$$

- A partir deste ponto seguimos o mesmo procedimento da regressão linear. Qual?
  - Derivar o quadrado dos resíduos em relação aos coeficientes do modelo
  - Igualamos as derivadas a zero e resolvemos o SELA associado

Regressão polinomial

- Para minimizarmos o resíduo, calculamos as derivadas de S_r com relação a a_0, a_1 e a_2

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum\left[\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right) x_i\right]$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum\left[\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right) x_i^2\right]$$

Regressão polinomial

- Calculamos o mínimo igualando a zero e agrupando

$$(n)a_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 + \left(\sum x_i^2\right)a_2 = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 + \left(\sum x_i^3\right)a_2 = \sum y_i x_i$$

$$\left(\sum x_i^2\right)a_0 + \left(\sum x_i^3\right)a_1 + \left(\sum x_i^4\right)a_2 = \sum y_i x_i^2$$

- Em notação matricial

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix}$$

Regressão polinomial

- Obtemos um sistema de três equações em três incógnitas
- Pode ser resolvido utilizando técnicas de resolução de SELAs

- O caso quadrático pode ser facilmente estendido para um polinômio de grau m

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m + e$$

- A soma do quadrado dos resíduos escreve-se

$$S_r = \sum e_i^2 = \sum \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x^m \right)^2$$

Regressão polinomial

- Seguindo um procedimento semelhante
  - Calculamos as derivadas em relação aos coeficientes a_i
  - Igualando a zero e agrupando
  - Obtemos o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \sum x_i^{m+2} & \cdots & \sum x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \\ \vdots \\ \sum y_i x_i^m \end{bmatrix}$$

- O problema de obter o polinômio de ajuste de grau m, se reduz, a resolver um SELA de ordem $m+1$

Regressão polinomial

- Temos uma matriz simétrica
- Matriz mal condicionada (grandes diferenças entre as ordens dos coeficientes)
- Para termos um ajuste de grau m são necessários pelo menos m+1 pontos
- Entretanto, o uso de polinômios de alta ordem não é recomendável
  - Polinômios de alta ordem apresentam comportamento oscilatório (indesejado)
- Por este motivo as matrizes de MQ geralmente são pequenas

Regressão polinomial

- Quais métodos de resolução de SELAs é apropriado para resolver a matriz de MQ?
  - Métodos diretos
  - Eliminação de Gauss com pivotamento
  - Pode falhar para matrizes mal condicionadas (m grande)
- Qual a estratégia apropriada para montagem da matriz de MQ?
  - Aproveitar a estrutura simétrica
  - Calcular as potencias de forma acumulativa $\left(x_i , x_i^2 , x_i^3 , \cdots , x_i^m \right)$

- **Desafio**: propor um algoritmo para montagem da matriz de MQ com dimensão arbitrária com o mínimo de operações possível (Enviar por email).

Regressão polinomial

- Da mesma forma que na regressão lineal a qualidade do ajuste polinomial pode ser avaliada a través do coeficiente de determinação r^2

- **Exemplo 4**: Ajuste um polinômio de segundo grau aos seguintes dados

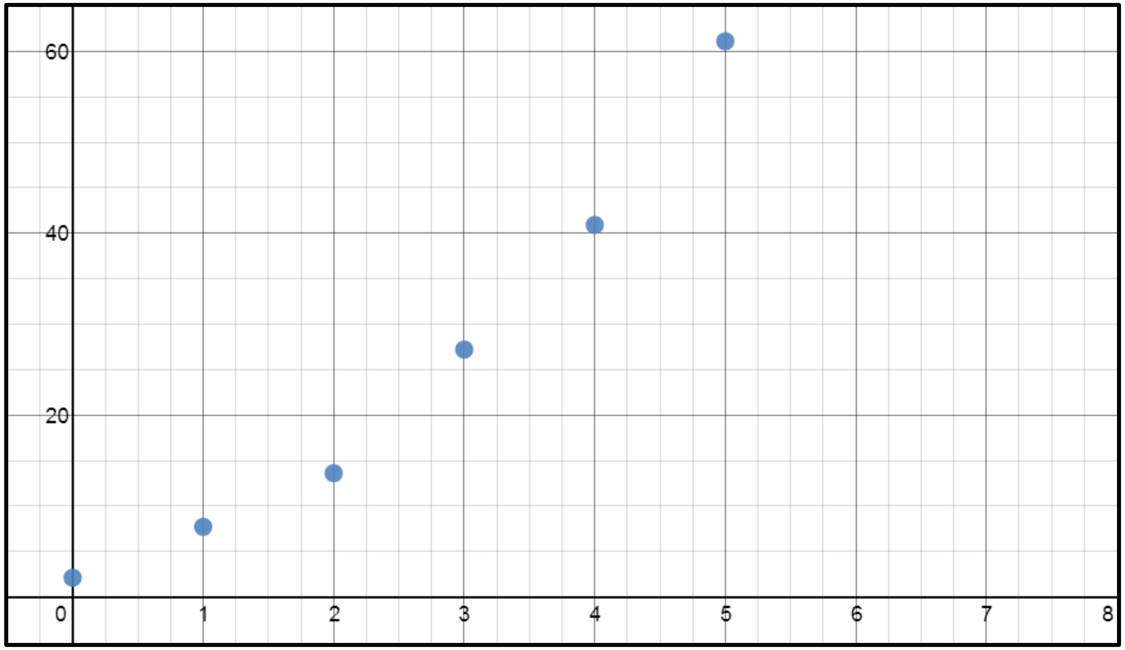
x_i	y_i
0,00	2,10
1,00	7,70
2,00	13,60
3,00	27,20
4,00	40,90
5,00	61,10

Avalie a qualidade do ajuste.

Regressão polinomial

- **Exemplo 4 . . .**

x_i	y_i
0,00	2,10
1,00	7,70
2,00	13,60
3,00	27,20
4,00	40,90
5,00	61,10



– Matriz do sistema (Excel)

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 152,6 \\ 585,6 \\ 2488,8 \end{bmatrix}$$

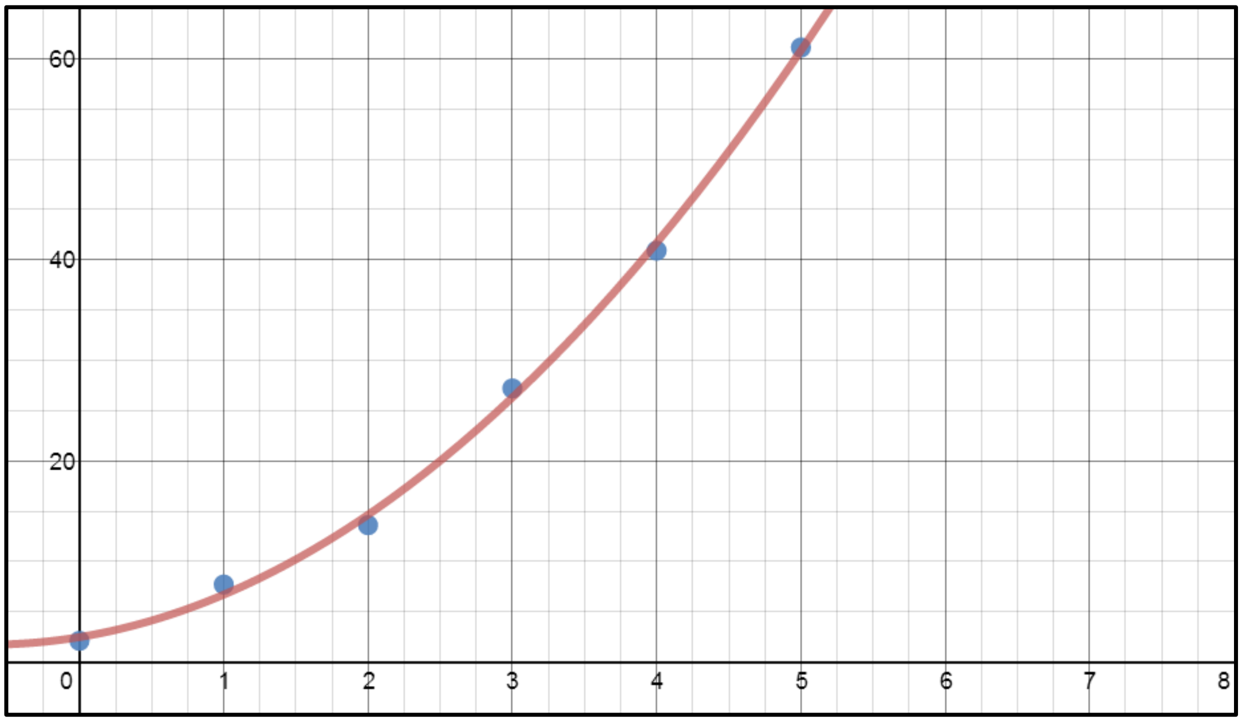
Regressão polinomial

- **Exemplo 4** . . .
  - Resolução do sistema

$$a_0 = 2,4786 \quad a_1 = 2,3593 \quad a_2 = 1,8607$$

  - Função de ajuste

$$y = 2,4786 + 2,3593x + 1,8607x^2$$



Regressão polinomial

- **Exemplo 4** . . .
  - Calculo do coeficiente de determinação

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

$$S_t = 2513,39$$

$$S_r = 3,75$$

$$r^2 = 0,9985$$

$$r = 0,9993$$

  - O ajuste quadrático descreve satisfatoriamente os dados

Regressão polinomial - Algoritmo

ENTRADA: ordem do polinômio de ajuste m
numero de pontos n
pontos de ajuste (x_i, y_i) $i=1:n$

SAÍDA: Coeficientes do polinomio $a_0, a_1, \ldots, a_m$
ou mensagem de falha

PASSO 1: Se $(n>m+1)$
Saída(Regressão impossível), FIM

PASSO 2: Montagem da matriz aumentada de MQ

PASSO 3: Resolução do SELA

PASSO 4: Saída $(a_0, \ldots, a_m)$, FIM

ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Regressão linear múltipla

- O ajuste de curvas pode ser estendido no caso de y ser uma função de duas ou mais variáveis independentes
- Poderíamos considerar funções de qualquer ordem (linear, quadrática, cubica)
- Por simplicidade, o ajuste mais utilizado é a regressão linear múltipla
- Considere y, uma função linear das variáveis independentes x_1 e x_2 na forma

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + e$$

- Dados *n* os pontos

$$\left(x_{11}, x_{21}, y_1\right), \left(x_{12}, x_{22}, y_2\right), \cdots, \left(x_{1n}, x_{2n}, y_n\right)$$

Regressão linear múltipla

- Como calcular os coeficientes da RLM?
  - Escrever a expressão do quadrado dos resíduos
  - Derivar a expressão em relação aos coeficientes
  - Conformar um sistema de eqs. igualando as derivadas a zero
  - Obter os coeficientes resolvendo o sistema
- Como avaliar a qualidade do ajuste?
  - Calcular os coeficientes de determinação e correlação

- **Atividade**: Obtenha a matriz de MQ para regressão linear múltipla (Deverá anexar este desenvolvimento na questão 2 da lista)

Regressão linear múltipla

- Matriz de regressão linear múltipla

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + e$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i} x_{2i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i} x_{2i} & \sum x_{2i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_{1i} \\ \sum y_i x_{2i} \end{bmatrix}$$

ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Formulação Geral de MQ

- Estudamos três tipos de regressão
  - linear simples, polinomial, linear múltipla
- Todos os tipos de regressão pertencem à formulação geral de mínimos quadrados

$$y = a_0 z_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \cdots + a_m z_m + e \quad (12)$$

  - a_k são os coeficientes de ajuste
  - z_k são as funções base
- Para regressão linear simples

$$z_0 = 1,\ z_1 = x,\ z_{2:m} = 0$$

- Para regressão polinomial

$$z_0 = 1,\ z_1 = x,\ z_2 = x^2, \ldots, z_m = x^m$$

Formulação Geral de MQ

- A formulação geral aplica-se a ajustes lineares, refere-se apenas a como o modelo depende dos parâmetros a_k coeficientes
- As funções base podem ser não-lineares (regressão polinomial)
- Outras funções bases não-lineares são:

$$z_0 = 1,\; z_1 = \cos(\omega t),\; ,\; z_2 = \sin(\omega t),\; z_{3:m} = 0$$

que representam a aproximação de Fourier na forma

$$y = a_0 + a_1 \cos(\omega t) + a_2 \sin(\omega t) + e$$

- Em resumo a eq. (12) representa uma formulação geral que inclui todos os tipos de ajuste (**lineares**)

Formulação Geral de MQ

- Considerando *n* pontos de dados a eq. (12) pode ser escrita em notação matricial na forma

$$\{Y\} = [Z]\{A\} + \{E\}$$

- $\{Y\}$ é o vetor coluna dos valores observados da variável dependente em n pontos

$$\{Y\}^T = [y_1, y_2, \cdots, y_n]$$

- $[Z]$ é a matriz dos valores calculados das $(m+1)$ funções base nos valores medidos (variáveis independentes) para os n pontos

Formulação Geral de MQ

$$[Z] = \begin{bmatrix} z_{01} & z_{11} & \cdots & z_{m1} \\ z_{02} & z_{12} & \cdots & z_{m2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ z_{0n} & z_{1n} & \cdots & z_{mn} \end{bmatrix}_{n\times(m+1)}$$

- linhas: n pontos
- colunas: $m+1$ funções base
- Z não é uma matriz quadrada

- $\{A\}$ vetor coluna dos coeficientes de ajuste

$$\{A\}^T = [a_0, a_1, \cdots, a_m]$$

Formulação Geral de MQ

- $\{E\}$ vetor coluna dos resíduos

$$\{E\}^T = [e_1, e_2, \cdots, e_n]$$

- Na formulação geral, a soma do quadrado dos resíduos é definida como

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j z_{ji} \right)^2$$

- A soma dos resíduos é minimizada quando
  - Calculamos as derivadas parciais em relação aos coeficientes a_k
  - Igualamos as condiciones resultantes a zero obtendo um sistema de equações

Formulação Geral de MQ

- O resultado deste processo escreve-se como

$$\left[[Z]^T[Z]\right]\{A\} = \left\{[Z]^T\{Y\}\right\} \quad (13)$$

- A eq. (13) representa o SELAs para calcular os coeficientes da regressão para uma família de funções base e um conjunto de dados

- **Exemplo 5**: Mostre que a formulação de mínimos quadrados generalizada inclui a regressão polinomial quadrática $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix}$$

Formulação Geral de MQ

- **Exemplo 5** . . .
  - As funções base para a regressão polinomial com $m=2$

$$z_0 = 1, z_1 = x, z_2 = x^2, z_{3:m} = 0$$

  - Considerando n pontos a formulação geral

$$\{Y\} = [Z]\{A\} + \{E\}$$

aparece como

$$\begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}_{n\times 3} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{Bmatrix}$$

Formulação Geral de MQ

- **Exemplo 5** . . .
  - Calculamos $\left[Z\right]^T$

$$\left[Z\right]^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \end{bmatrix}_{3\times n}$$

  - Multiplicamos $\left[Z\right]^T\left[Z\right]$

$$\left[\left[Z\right]^T\left[Z\right]\right] = \begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Formulação Geral de MQ

- **Exemplo 5** . . .
  - Multiplicamos $\left[Z\right]^T\left\{Y\right\}$

$$\left[Z\right]^T\left\{Y\right\}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n\\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2\end{bmatrix}_{3\times n}\begin{Bmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_n\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}\sum y_i\\ \sum y_i x_i\\ \sum y_i x_i^2\end{Bmatrix}$$

Formulação Geral de MQ

- **Exemplo 5** . . .
  - Considerando a expressão do SELA

$$\left[[Z]^T[Z]\right]\{A\} = \left\{[Z]^T\{Y\}\right\}$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix}$$

- Praticamente todas as abordagens de ajustes por mínimos quadrados podem ser representadas pela formulação geral
- Ademais, a formulação geral oferece um mecanismo simples para calcular a matriz do SELA

ROTEIRO

- Introdução
- Regressão linear
- Linearização de funções não-lineares
- Regressão polinomial
- Regressão múltipla
- Modelo geral de mínimos quadrados
- Comentários finais

Comentários Finais

- O ajuste de curvas é utilizado para
  - obter funções que descrevam o comportamento de conjuntos de dados
  - construção e aceitação de modelos
  - simplificar funções complexas
- Uma das alternativas mais utilizadas é o ajuste onde o quadrado da soma dos resíduos é minimizado (mínimos quadrados)
- Obtemos a expressão que minimiza a soma dos resíduos
  - derivando em relação aos coeficientes de ajuste
  - igualando a zero e construindo um SELA

Comentários Finais

- Etapas do ajuste
  1. Plotar o conjunto de dados
  2. Identificar tendências e escolher a função de ajuste
     - regressão linear
     - regressão polinomial
  3. Construção da matriz de mínimos quadrados
     - Alto custo computacional
     - Enfoque acumulativo ou formulação geral
  4. Obter os coeficientes resolvendo o sistema
     - matrizes mal condicionadas
     - métodos diretos
  5. Avaliar a qualidade do ajuste

Comentários Finais

- A qualidade do ajuste pode ser avaliado usando o coeficiente de determinação e/ou correlação
- Para dados que não se ajustem ao modelo linear
  - Escolher modelo não-linear
  - Linearizar usando transformações
  - Resolver por regressão simples
- Se o modelo não pode ser linearizado
  - Utilizar regressão não-linear (não abordado)
  - Método de Gauss-Newton (não abordado)

Comentários Finais

- Os métodos de regressão por mínimos quadrados
  - Estreitamente ligados com o processamento estatístico de dados
  - Apenas ilustramos os métodos utilizando um enfoque prático
  - Os fundamentos teóricos dos métodos de regressão envolvem fundamentos de estatística