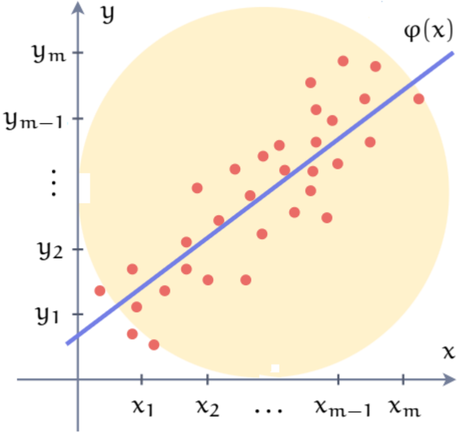
CÁLCULO NUMÉRICO
UERJ

Método dos Mínimos Quadrados - Caso Linear

Rodrigo Madureira
rodrigo.madureira@ime.uerj.br
IME-UERJ

Sumário

Introdução



Seja a tabela a seguir:

x	x_1	x_2	$\dots$	x_{m-1}	x_m
y	y_1	y_2	$\dots$	y_{m-1}	y_m

Desejamos ajustar uma curva $y = \varphi(x)$ aos pontos da tabela.

Essa curva pode ser uma reta, uma parábola, uma exponencial, etc.

Se for escolhida uma reta
$\varphi(x) = ax + b$,
devemos determinar a e b de modo que a reta se ajuste ao conjunto de pontos dados com o mínimo de desvios entre os pontos e a reta.

Introdução

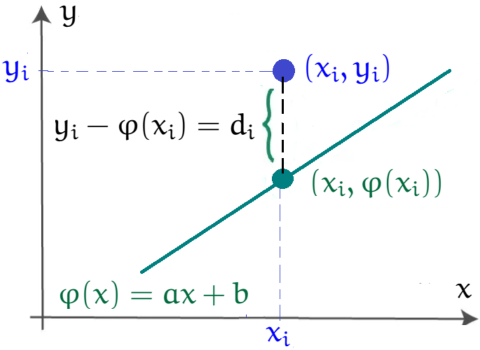


Figura: Visão macroscópica de um ponto da tabela e da reta

Denotamos
$d_i = y_i - \varphi(x_i) = y_i - ax_i - b$
como o **desvio de cada ponto** (x_i, y_i) **da tabela em relação à reta** $\varphi(x)$.

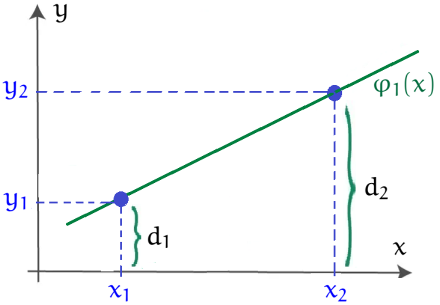
O ideal seria que cada desvio fosse nulo para o ajuste da reta, mas em geral,
$\varphi(x_i) = ax_i + b \neq y_i$.

E por que usamos a abordagem da **soma dos mínimos quadrados dos desvios** para fazer o **ajuste da reta aos pontos**?

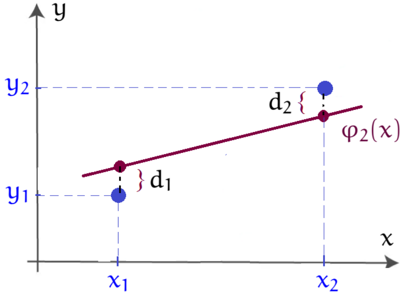
Introdução

Abordagem 1: Minimizar a soma dos desvios

Exemplo: Ajuste de uma reta a apenas dois pontos (x_1, y_1) e (x_2, y_2).



$d_1 = d_2 = 0$
$\Rightarrow S_1 = d_1 + d_2 = 0 + 0 = 0$

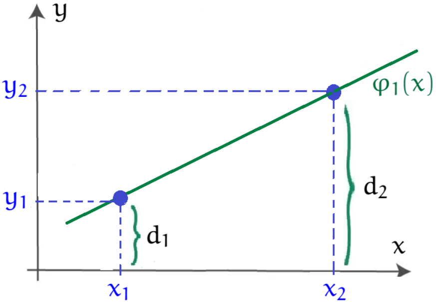


$d_2 = -d_1$
$\Rightarrow S_2 = d_1 + d_2 = d_1 + (-d_1) = 0$

Problema: A reta $\varphi_1(x)$ se ajusta perfeitamente aos dois pontos. Mas, não é a única que se ajusta a eles com soma de desvios nula. Logo, esta abordagem falha.

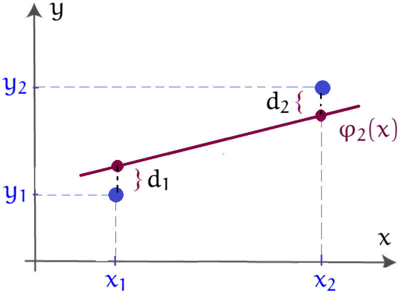
Introdução

Abordagem 2: Minimizar a soma dos módulos dos desvios ($S = |d_1| + |d_2|$)



$|d_1| = |d_2| = 0$

$\Rightarrow S_1 = |d_1| + |d_2| = 0 + 0 = 0$



$d_2 = -d_1 \Rightarrow |d_2| = |d_1|$

$\Rightarrow S_2 = |d_1| + |d_2| = 2|d_1| \neq 0$

Problema: Para minimizar uma função, devemos derivá-la e igualar a zero. Porém, a função modular $|d_i| = |y_i - ax_i - b|$ não possui derivada na origem em relação às incógnitas a e b, para $i = 1,\ 2$. Logo, esta abordagem também falha.

Método dos Mínimos Quadrados - Caso Linear

Então, vamos tratar da abordagem que realmente funciona: **minimizar a soma dos quadrados dos desvios**.

Se temos uma tabela com m pontos

x	x_1	x_2	$\ldots$	x_{m-1}	x_m
y	y_1	y_2	$\ldots$	y_{m-1}	y_m

e queremos ajustá-los a uma reta $\varphi(x) = ax + b$ de modo a **minimizar os quadrados dos desvios** $d_i^2 = (y_i - \varphi(x_i))^2 = (y_i - ax_i - b)^2$, para $i = 1, 2, \ldots, m$.

Neste caso, a reta que se ajusta aos pontos é única e o desvio ao quadrado d_i^2 possui derivada em relação às incógnitas a e b em cada ponto $i = 1, 2, \ldots, m$.

Assim, a **soma dos quadrados dos desvios** será dada por:

$$S = d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_m^2 = \sum_{i=1}^{m} d_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (y_i - ax_i - b)^2$$

Método dos Mínimos Quadrados - Caso Linear

Para achar a **reta que minimiza a soma dos quadrados dos desvios**, devemos encontrar os valores de seus coeficientes a e b, que são as nossas incógnitas.

Para **minimizar a soma dos quadrados destes desvios**, devemos derivar S em relação às incógnitas a e b e igualar a zero:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0, \quad (1) \qquad \frac{\partial S}{\partial b} = 0. \quad (2)$$

De (1), obtemos:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial a}\left(\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b)^2\right) = \sum_{i=1}^{m}\left[\frac{\partial}{\partial a}(y_i - ax_i - b)^2\right] = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m}[2(y_i - ax_i - b)(-x_i)] = 0 \Rightarrow \cancel{2}\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m}(-x_iy_i + ax_i^2 + bx_i) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{m}(-x_iy_i) + \sum_{i=1}^{m} ax_i^2 + \sum_{i=1}^{m} bx_i = 0$$

$$\Rightarrow a\sum_{i=1}^{m} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} x_iy_i \qquad (3)$$

Método dos Mínimos Quadrados - Caso Linear

De (2), obtemos:

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial b}\left(\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b)^2\right) = \sum_{i=1}^{m}\left[\frac{\partial}{\partial b}(y_i - ax_i - b)^2\right] = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m}[2(y_i - ax_i - b)(-1)] = 0 \Rightarrow \cancel{2}\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b)(-1) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m}(-y_i + ax_i + b) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{m}(-y_i) + \sum_{i=1}^{m} ax_i + \sum_{i=1}^{m} b = 0$$

$$\Rightarrow a\sum_{i=1}^{m} x_i + b\sum_{i=1}^{m} 1 = \sum_{i=1}^{m} y_i \quad \Rightarrow a\sum_{i=1}^{m} x_i + b \cdot m = \sum_{i=1}^{m} y_i \qquad (4)$$

Logo, para descobrir a **reta dos mínimos quadrados** $\varphi(x) = ax + b$, devemos descobrir a e b através do sistema formado pelas equações (3) e (4):

$$\begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) a + \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right) b = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{m} 1\right) b = \sum_{i=1}^{m} y_i \end{cases}$$

Método dos Mínimos Quadrados - Caso Linear

Resumindo:

Para achar a **reta** $\varphi(x) = ax + b$ **que se ajusta aos pontos de uma tabela**

x	x_1	x_2	$\dots$	x_{m-1}	x_m
y	y_1	y_2	$\dots$	y_{m-1}	y_m

pelo Método dos Mínimos Quadrados, devemos encontrar primeiro as incógnitas a e b da reta no sistema linear

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \underbrace{\sum_{i=1}^{m} 1}_{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{m} y_i \end{bmatrix}$$

Exemplo

Considere a tabela

x	$1,0$	$3,0$	$4,0$	$6,0$	$8,0$	$9,0$	$11,0$	$14,0$
$f(x)$	$1,0$	$2,0$	$4,0$	$4,0$	$5,0$	$7,0$	$8,0$	$9,0$

Estime o valor de $f(15,5)$ com o ajuste pela reta dos mínimos quadrados.

Solução: Nete exemplo, temos 8 pontos na tabela. Logo, $m = 8$. Portanto, para achar as incógnitas a e b da reta $\varphi(x) = ax + b$, devemos resolver o sistema linear

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{8} x_i^2 & \sum_{i=1}^{8} x_i \\ \sum_{i=1}^{8} x_i & \underbrace{\sum_{i=1}^{8} 1}_{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{8} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{8} y_i \end{bmatrix}$$

Exemplo

Vamos resolver primeiro os somatórios da seguinte forma:

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	$1,0$	$1,0$	$1,0$	$1,0$
2	$3,0$	$2,0$	$9,0$	$6,0$
3	$4,0$	$4,0$	$16,0$	$16,0$
4	$6,0$	$4,0$	$36,0$	$24,0$
5	$8,0$	$5,0$	$64,0$	$40,0$
6	$9,0$	$7,0$	$81,0$	$63,0$
7	$11,0$	$8,0$	$121,0$	$88,0$
8	$14,0$	$9,0$	$196,0$	$126,0$
SOMAS	$56,0$	$40,0$	$524,0$	$364,0$

Agora, resolvemos o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 524 & 56 \\ 56 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 364 \\ 40 \end{bmatrix}$$

Exemplo

Usando Eliminação de Gauss, obtemos o sistema aumentado:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 524 & 56 & 364 \\ 56 & 8 & 40 \end{array}\right] \begin{array}{ll} L_1 & (\div 4) \\ L_2 & (\div 8) \end{array} \begin{array}{c} \Rightarrow \\ \Rightarrow \end{array} \left[\begin{array}{cc|c} 131 & 14 & 91 \\ 7 & 1 & 5 \end{array}\right] \begin{array}{l} L_1 \\ L_2 \end{array}$$

$$\text{pivô} = 131; \quad m_{21} = \frac{7}{131} \Rightarrow L_2 \leftarrow L_2 - \frac{7}{131} L_1.$$

$$\left[\begin{array}{cc|c} 131 & 14 & 91 \\ 0 & 33/131 & 18/131 \end{array}\right] \begin{array}{l} L_1 \\ L_2 \end{array}$$

Solução:

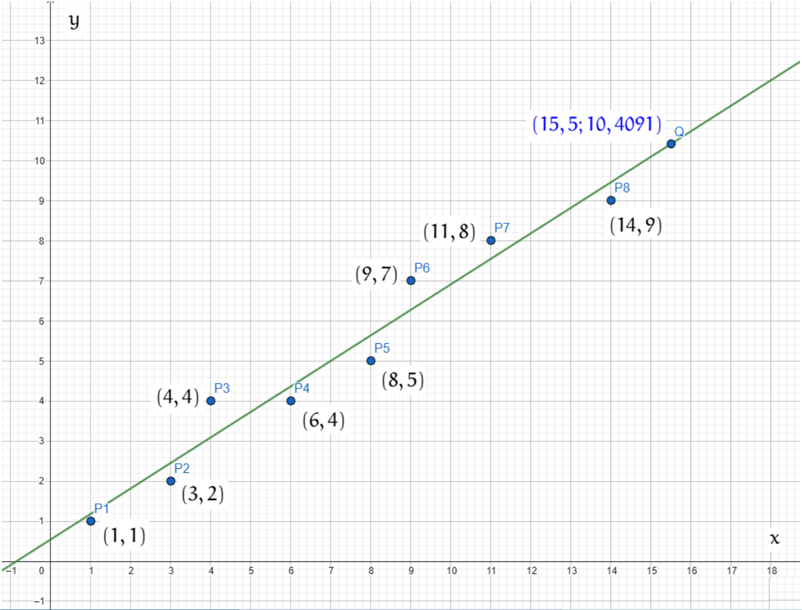
$$b = \frac{18}{33} = \frac{6}{11}; \quad 131a + 14\left(\frac{6}{11}\right) = 91 \Rightarrow a = \frac{7}{11}.$$

Logo, a reta dos mínimos quadrados procurada é $\varphi(x) = \frac{7}{11}x + \frac{6}{11}$.

Agora, para estimar o valor de $f(15,5)$, basta calcular $\varphi(15,5)$ na reta encontrada:

$$\varphi(15,5) = \frac{7}{11}(15,5) + \frac{6}{11} \approx 10,4091.$$

Exemplo



Referências I

DORN, W. S.; McCRACKEN, D.D.. **Cálculo Numérico Com Estudos de Casos Em Fortran IV**. Ed. Campus, 1978.

RUGGIERO, M.; LOPES, V.. **Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais**. Pearson, 1996, 2a. Ed.

BURDEN, R.. **Numerical Analysis**. Brooks/Cole Pub Co, 1996, 6th Edition.