Método de Quadrados Mínimos: Caso discreto

Marina Andretta

ICMC-USP

23 de maio de 2012

Baseado no livro Análise Numérica, de R. L. Burden e J. D. Faires.

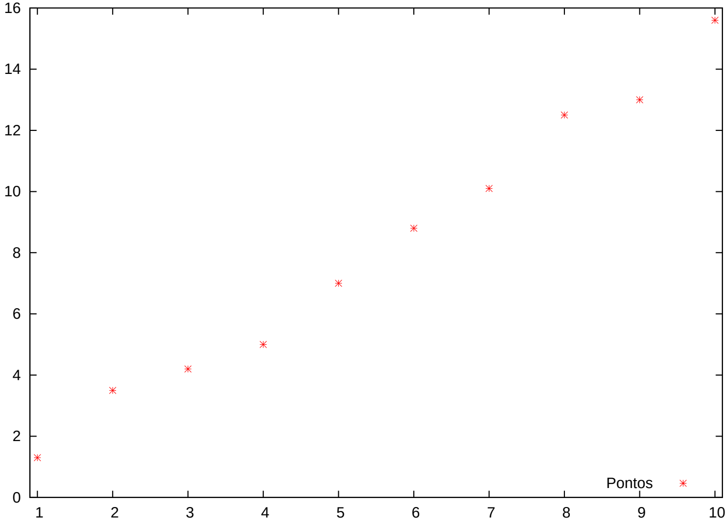
Aproximação de funções

Considere o problema, dada uma tabela de valores $(x_i, f(x_i))$, estimar valores de f em pontos não tabulados.

Tome, por exemplo, os seguintes dados:

x_i	$f(x_i)$
1	1.3
2	3.5
3	4.2
4	5.0
5	7.0
6	8.8
7	10.1
8	12.5
9	13.0
10	15.6

Aproximação de funções

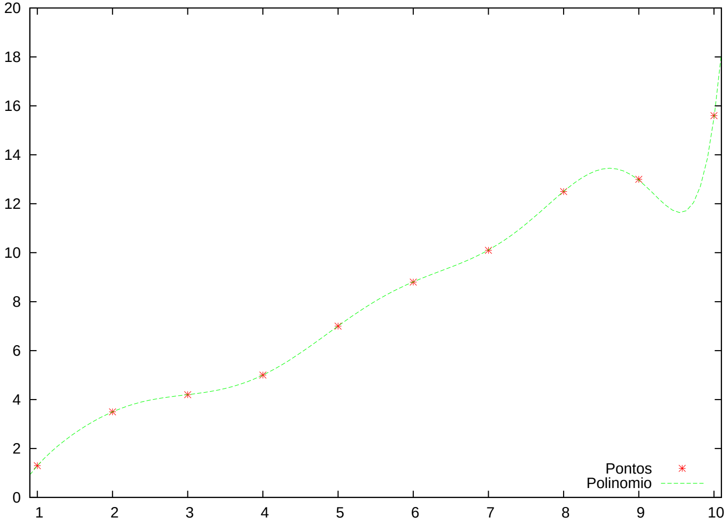


Podemos notar que os pontos no gráfico se aproximam de uma reta. Provavelmente os pontos não formam, de fato, uma reta por conterem erros.

Assim, não é razoável exigir que uma função que aproxime os pontos dados passe por todos os pontos. Ou seja, se usarmos interpolação polinomial para aproximar os dados, obteremos uma aproximação indesejada.

O gráfico a seguir mostra o polinômio interpolador de grau 9 para o exemplo anterior.

Aproximação de funções



Claramente este é um preditor ruim para valores de função em diversos pontos.

Neste caso, uma abordagem melhor seria encontrar uma reta que "melhor" se aproxima dos pontos dados, que não necessariamente passe pelos pontos dados.

Para isso, é necessário definir o que uma "melhor" aproximação.

Seja m o número de pontos disponíveis. Denote por y_i o valor $f(x_i)$. Denote por $a_1x + a_0$ a reta que queremos encontrar. Então, o valor da reta em um ponto x_i é dado por $a_1x_i + a_0$.

O problema de encontrar a reta que obtém o menor erro absoluto em relação aos pontos dados é o mesmo de encontrar os valores de a_0 e a_1 que minimizem

$$E_0(a_0, a_1) = \max_{1 \leq i \leq m} \{|y_i - (a_1x_i + a_0)|\}.$$

Este é um problema chamado de minmax e não pode ser tratado usando técnicas elementares.

Outra alternativa é encontrar os valores de a_0 e a_1 que minimizem o desvio absoluto, dado por

$$E_1(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{m} |y_i - (a_1 x_i + a_0)|.$$

Para encontrar a solução para este problema, é necessário calcular as derivadas parciais de E_1 e igualá-las a zero. Ou seja,

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_0} \sum_{i=1}^{m} |y_i - (a_1 x_i + a_0)|$$

e

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{i=1}^{m} |y_i - (a_1 x_i + a_0)|.$$

O problema com esta formulação é que a função E_1 não é diferenciável no ponto 0, o que significa que podemos não encontrar uma solução para estas equações.

Aproximação de funções

Outra alternativa é encontrar os valores de a_0 e a_1 que minimizem

$$E_2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - (a_1 x_i + a_0))^2.$$

Esta abordagem é chamada de Quadrados Mínimos.

Uma vantagem desta abordagem é que este cálculo de erro, apesar de dar bastante peso a pontos que estejam mais longe da reta, não permite que estes desvios dominem a aproximação.

Assim, o problema de encontrar uma reta que se ajuste aos pontos dados usando o Método de Quadrados Mínimos consiste em encontrar valores de a_0 e a_1 que minimizem

$$E \equiv E_2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - (a_1 x_i + a_0))^2.$$

Note que esta função é uma quadrática convexa. Ou seja, para encontrar seu mínimizador, basta calcular as derivadas parciais e igualá-las a zero.

Método de Quadrados Mínimos (reta)

Ou seja, basta calcular a_0 e a_1 solução de

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_0} \sum_{i=1}^{m} (y_i - (a_1 x_i + a_0))^2 = 2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - a_1 x_i - a_0)(-1)$$

e

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{i=1}^{m} (y_i - (a_1 x_i + a_0))^2 = 2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - a_1 x_i - a_0)(-x_i).$$

Método de Quadrados Mínimos (reta)

Reordenando as equações, temos o sistema linear

$$\left\{ \begin{array}{lcccl} a_0 m & + & a_1 \sum_{i=1}^m x_i & = & \sum_{i=1}^m y_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i & + & a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 & = & \sum_{i=1}^m x_i y_i. \end{array} \right.$$

Estas equações são conhecidas por equações normais.

Método de Quadrados Mínimos (reta)

Para este caso, que possui apenas duas variáveis, as soluções do sistema são dadas por

$$a_0 = \frac{(\sum_{i=1}^m x_i^2)(\sum_{i=1}^m y_i) - (\sum_{i=1}^m x_i y_i)(\sum_{i=1}^m x_i)}{m(\sum_{i=1}^m x_i^2) - (\sum_{i=1}^m x_i)^2}$$

e

$$a_1 = \frac{m(\sum_{i=1}^m x_i y_i) - (\sum_{i=1}^m x_i)(\sum_{i=1}^m y_i)}{m(\sum_{i=1}^m x_i^2) - (\sum_{i=1}^m x_i)^2}.$$

Método de Quadrados Mínimos (reta) - exemplo

Considere os dados apresentados na tabela a seguir (os pontos são os mesmos usados no primeiro exemplo):

x_i	y_i
1	1.3
2	3.5
3	4.2
4	5.0
5	7.0
6	8.8
7	10.1
8	12.5
9	13.0
10	15.6

Método de Quadrados Mínimos (reta) - exemplo

Para utilizar o Método dos Quadrados Mínimos, precisamos calcular os valores de $\sum_{i=1}^{m} x_i$, $\sum_{i=1}^{m} y_i$, $\sum_{i=1}^{m} x_i^2$ e $\sum_{i=1}^{m} x_i y_i$. Assim, aumentamos a tabela, calculando estes valores:

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	1.3	1	1.3
2	3.5	4	7.0
3	4.2	9	12.6
4	5.0	16	20.0
5	7.0	25	35.0
6	8.8	36	52.8
7	10.1	49	70.7
8	12.5	64	100.0
9	13.0	81	117.0
10	15.6	100	156.0
55	81.0	385	572.4

Método de Quadrados Mínimos (reta) - exemplo

Resolvendo as equações normais, temos que

$$a_0 = \frac{385 \times 81 - 572.4 \times 55}{10 \times 385 - 55^2} = -0.36$$

e

$$a_1 = \frac{10 \times 572.4 - 55 \times 81}{10 \times 385 - 55^2} = 1.538.$$

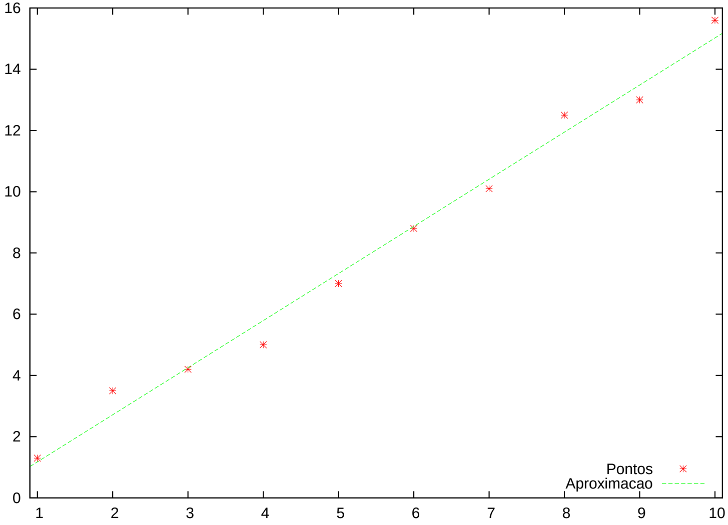
Ou seja, a reta que aproxima os dados é dada por $P(x) = 1.538x - 0.36$.

Método de Quadrados Mínimos (reta) - exemplo

A tabela foi aumentada, mais uma vez, para calcular o erro obtido na aproximação dos dados pela reta $P(x)$:

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$	$P(x_i) = 1.538x_i - 0.36$
1	1.3	1	1.3	1.18
2	3.5	4	7.0	2.72
3	4.2	9	12.6	4.25
4	5.0	16	20.0	5.79
5	7.0	25	35.0	7.33
6	8.8	36	52.8	8.87
7	10.1	49	70.7	10.41
8	12.5	64	100.0	11.94
9	13.0	81	117.0	13.48
10	15.6	100	156.0	15.02
55	81.0	385	572.4	$E_2 = \sum_{i=1}^{10}(y_i - P(x_i))^2 \approx 2.34$

Método de Quadrados Mínimos (reta) - exemplo



Método de Quadrados Mínimos (polinômio)

De maneira análoga, podemos utilizar o Método de Quadrados Mínimos para aproximar um conjunto de dados $\{(x_i, y_i), i = 1, 2, ..., m\}$ por um polinômio

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0$$

de grau $n < m - 1$.

Método de Quadrados Mínimos (polinômio)

Neste caso, estamos interessados em encontrar $a_0, a_1, ..., a_n$ que minimizem

$$E_2 = \sum_{i=1}^{m} (y_i - P_n(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{m} y_i^2 - 2\sum_{i=1}^{m} P_n(x_i) y_i + \sum_{i=1}^{m} (P_n(x_i))^2 =$$

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

$$\sum_{i=1}^{m} y_i^2 - 2\sum_{j=0}^{n} a_j \left(\sum_{i=1}^{m} y_i x_i^j \right) + \sum_{j=0}^{n} \sum_{k=0}^{n} a_j a_k \left(\sum_{i=1}^{m} x_i^{j+k} \right).$$

Método de Quadrados Mínimos (polinômio)

Mais uma vez, a função E_2 é uma quadrática convexa. Assim, para encontrar seu minimizador, basta calcular $a_0, a_1, ..., a_n$ que anulem suas derivadas parciais.

Ou seja, $a_0, a_1, ..., a_n$ devem satisfazer

$$0 = \frac{\partial E_2}{\partial a_j} = -2 \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^j + 2 \sum_{k=0}^{n} a_k \sum_{i=1}^{m} x_i^{j+k}$$

$$\sum_{k=0}^{n} a_k \sum_{i=1}^{m} x_i^{j+k} = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^j,$$

para cada $j = 0, 1, ..., n$

Método de Quadrados Mínimos (polinômio)

Neste caso, as equações normais são dadas por

$$\begin{cases} a_0 \sum_{i=1}^m x_i^0 & + & a_1 \sum_{i=1}^m x_i^1 & + & \dots & + & a_n \sum_{i=1}^m x_i^n & = & \sum_{i=1}^m y_i x_i^0, \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i^1 & + & a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 & + & \dots & + & a_n \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} & = & \sum_{i=1}^m y_i x_i^1, \\ \vdots \\ a_0 \sum_{i=1}^m x_i^n & + & a_1 \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} & + & \dots & + & a_n \sum_{i=1}^m x_i^{2n} & = & \sum_{i=1}^m y_i x_i^n. \end{cases}$$

É possível mostrar que este sistema possui solução única quando os pontos x_i são distintos.

Considere os dados da tabela a seguir:

i	x_i	y_i
1	0.00	1.0000
2	0.25	1.2840
3	0.50	1.6487
4	0.75	2.1170
5	1.00	2.7183

Método de Quadrados Mínimos (polinômio) - exemplo

Para calcularmos um polinômio de grau dois que aproxime os dados, usando o Método de Quadrados Mínimos, devemos resolver o sistema linear

$$\left\{\begin{array}{ccccccc} 5.0000a_0 & + & 2.5000a_1 & + & 1.8750a_2 & = & 8.7680, \\ 2.5000a_0 & + & 1.8750a_1 & + & 1.5625a_2 & = & 5.4514, \\ 1.8750a_0 & + & 1.5625a_1 & + & 1.3828a_2 & = & 4.4015. \end{array}\right.$$

Método de Quadrados Mínimos (polinômio) - exemplo

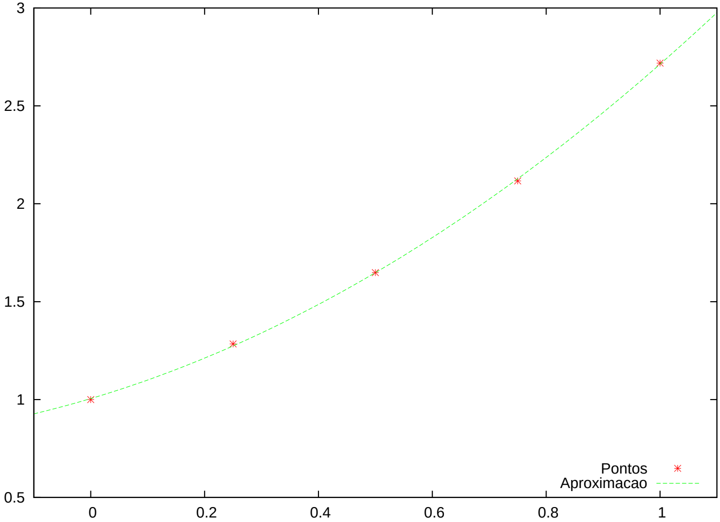
A solução do sistema é dada por

$$a_0 = 1.0051, \quad a_1 = 0.86468, \quad a_2 = 0.84316.$$

Ou seja, o polinômio de grau no máximo dois que melhor se aproxima dos dados (no sentido de quadrados mínimos) é

$$P(x) = 1.0051 + 0.86468x + 0.84316x^2.$$

Método de Quadrados Mínimos (polinômio) - exemplo



Método de Quadrados Mínimos (polinômio) - exemplo

A tabela com os dados foi completada com dados do polinômio calculado:

i	x_i	y_i	$P(x_i)$	$y_i - P(x_i)$
1	0.00	1.0000	1.0051	-0.0051
2	0.25	1.2840	1.2740	0.0100
3	0.50	1.6487	1.6482	0.0004
4	0.75	2.1170	2.1279	-0.0109
5	1.00	2.7183	2.7129	0.0054

O erro total é dado por

$$E_2 = \sum_{i=1}^{5} (y_i - P(x_i))^2 = 2.74 \times 10^{-4}.$$

Método de Quadrados Mínimos (exponencial)

Em alguns casos, é desejável aproximar os dados fornecidos por uma função exponencial

$$y = be^{ax} \tag{1}$$

ou

$$y = bx^{a}. \tag{2}$$

Método de Quadrados Mínimos (exponencial)

Para estes casos, ao aplicarmos o Método de Quadrados Mínimos, teríamos de minimizar as funções

$$E = \sum_{i=1}^{m} (y_i - b e^{a x_i})^2$$

ou

$$E = \sum_{i=1}^{m} (y_i - b x_i^a)^2.$$

Novamente, para encontrar o minimizador destas funções, é necessário encontrar os pontos a e b que façam com que as derivadas parciais se anulem.

No caso da primeira função (1), temos

$$0 = \frac{\partial E}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - be^{ax_i})(-e^{ax_i})$$

e

$$0 = \frac{\partial E}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - be^{ax_i})(-bx_i e^{ax_i}).$$

No caso da segunda função (2), temos

$$0 = \frac{\partial E}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - bx_i^a)(-x_i^a)$$

e

$$0 = \frac{\partial E}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - bx_i^a)(-bx_i^a \ln(x_i)).$$

Note que, neste caso, o sistema formado pelas equações normais não é linear. Assim, não há métodos exatos para encontrar os valores de a e b.

Uma alternativa para contornar esta dificuldade é tomar o logarítmo das funções (1) e (2).

Assim, temos

$$\ln(y) = \ln(b) + ax$$

ou

$$\ln(y) = \ln(b) + a\ln(x).$$

Desta maneira, podemos calcular $\ln(b)$ e a usando a mesma ideia usada para aproximar os dados por retas.

Note que esta **NÃO** é uma aproximação pelo Método de Quadrados Mínimos das funções (1) e (2). De fato, esta aproximação pode diferir significativamente da aproximação por Método de Quadrados Mínimos das funções originais.

Considere os dados fornecidos na tabela a seguir:

i	x_i	y_i
1	1.00	5.10
2	1.25	5.79
3	1.50	6.53
4	1.75	7.45
5	2.00	8.46

Como os pontos $(x_i, \ln(y_i))$ parecem ter uma relação linear, vamos utilizar a aproximação $y = be^{ax}$ (ou $\ln(y) = \ln(b) + ax$).

Método de Quadrados Mínimos (exponencial) - exemplo

Para resolver as equações normais, precisamos calcular os valores de $\sum_{i=1}^{m} x_i$, $\sum_{i=1}^{m} \ln(y_i)$, $\sum_{i=1}^{m} x_i^2$ e $\sum_{i=1}^{m} x_i \ln(y_i)$. Assim, aumentamos a tabela, calculando estes valores:

i	x_i	y_i	$\ln(y_i)$	x_i^2	$x_i \ln(y_i)$
1	1.00	5.10	1.629	1.0000	1.629
2	1.25	5.79	1.756	1.5625	2.195
3	1.50	6.53	1.876	2.2500	2.814
4	1.75	7.45	2.008	3.0625	3.514
5	2.00	8.46	2.135	4.0000	4.270
	7.50		9.404	11.8750	14.422

Método de Quadrados Mínimos (exponencial) - exemplo

Resolvendo as equações normais, temos que

$$a = \frac{5 \times 14.422 - 7.5 \times 9.404}{5 \times 11.875 - 7.5^2} = 0.5056$$

e

$$\ln(b) = \frac{11.875 \times 9.404 - 14.422 \times 7.5}{5 \times 11.875 - 7.5^2} = 1.122.$$

Como $\ln(b) = 1.122$, temos que $b = e^{1.122} = 3.071$.

Assim, temos a aproximação $y = 3.071e^{0.5056x}$.

Método de Quadrados Mínimos (exponencial) - exemplo

Na tabela a seguir, podemos comparar os valores de y_i e da aproximação $3.071e^{0.5056x_i}$:

i	x_i	y_i	$3.071e^{0.5056x_i}$
1	1.00	5.10	5.09
2	1.25	5.79	5.78
3	1.50	6.53	6.56
4	1.75	7.45	7.44
5	2.00	8.46	8.44

Método de Quadrados Mínimos (exponencial) - exemplo