AJUSTE POR MÍNIMOS QUADRADOS

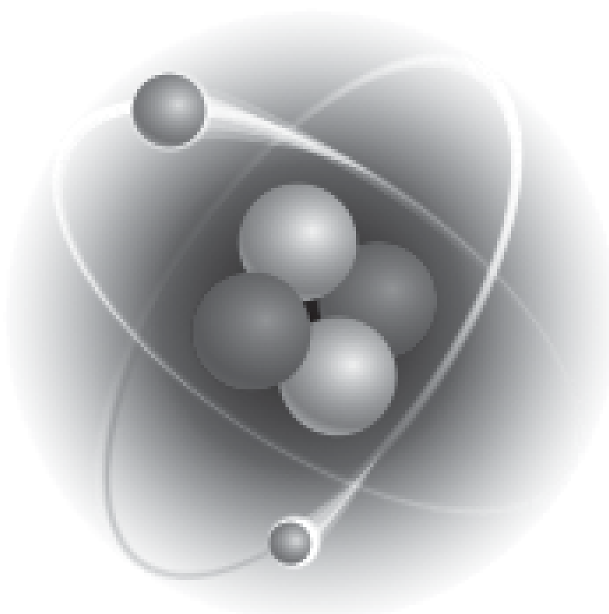
17
aula

META

Conduzir o aluno a aplicar o método de ajuste por mínimos quadrados, efetuando uma regressão linear e oferecer ao aluno uma oportunidade de praticar a aplicação do método

OBJETIVOS

Ao final desta aula o aluno deverá:
deduzir a expressão geral para o ajuste por mínimos quadrados;
selecionar um conjunto de dados para aplicação do método;
construir as matrizes que serão utilizadas nas operações envolvidas no método;
determinar os parâmetros do modelo linear, a partir das operações com as matrizes.



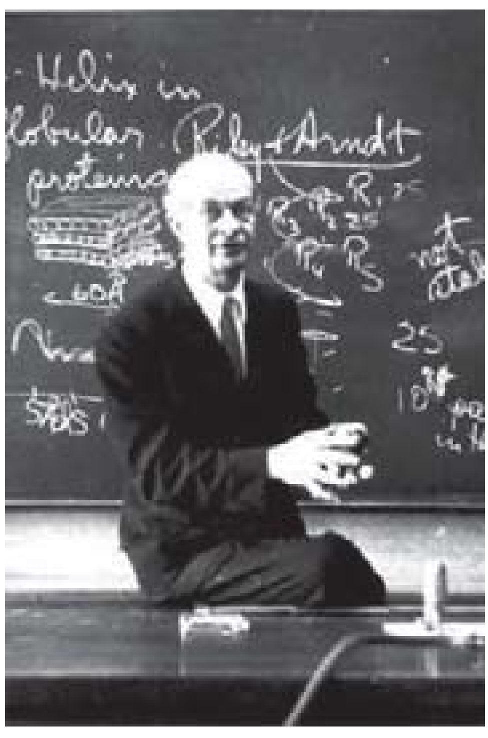
Símbolo químico (Fonte: www.contestado.com.br).

PRÉ-REQUISITOS

Conceito de variáveis correlacionadas, compreensão da forma da equação de uma reta e do significado de ajustar dados a um modelo, introduzidos na aula anterior.

INTRODUÇÃO

Na última aula demos início ao estudo dos ajustes de modelos a partir de dados experimentais, com um número suficiente de valores para as variáveis mais relevantes. Tivemos o cuidado de destacar que quando nos deparamos com este tipo de conjunto de dados, é importante primeiramente analisar o comportamento relativo (crescente ou decrescente) das variáveis, uma em função da outra. Em seguida, para maior praticidade, representá-los em um gráfico para visualizar este comportamento. Vimos também, ilustrando com o modelo linear (que será o modelo enfatizado neste curso), que o ajuste matemático pode ser feito pela determinação dos parâmetros do modelo (bo e b_1). É chegada a hora de aprendermos a aplicar este procedimento, determinando os valores dos parâmetros a partir de dados experimentais. Vale destacar que hoje em dia a grande maioria das calculadoras científicas executa esta operação rapidamente, sendo, contudo, importante que o aluno tenha conhecimento do que está envolvido nesta operação.



Professor explicando dados químicos, fotografia, autor desconhecido (Fonte: www.colegiosaofrancisco.com.br).

Partindo do modelo linear especificado anteriormente:

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$$

onde:

$\hat{y}_i$ é o valor de resposta previsto pelo modelo

x_i é o valor da variável experimental

b_o e b_1 são os parâmetros do modelo

EQUAÇÕES

Definimos os resíduos e_i como sendo a diferença entre o valor de resposta experimental e previsto pelo modelo:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$

Em termos matriciais podemos escrever:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{Xb}$$

Os valores b_o e b_1 podem ser determinados resolvendo-se a equação (semelhante à equação anterior, com os dois membros multiplicados por X^t):

$$\mathbf{X^t X b = X^t y}$$

Isolando b, que é o que queremos determinar, teremos:

$$\mathbf{b = (X^t X)^{-1} X^t y}$$

Esta equação dá a solução geral para o ajuste de um modelo por mínimos quadrados para o comportamento linear. Por exemplo, se utilizarmos os dados na tabela abaixo, que são semelhantes ao conjunto total de dados que vimos na aula anterior, podemos ilustrar a aplicação deste método. Neste caso, colocamos como resposta a idade e como a variável medida o comprimento das asas, pois pode ser interessante usar este parâmetro para estimar a idade das aves.

Dados:

Idade x	C. Asas y	Ajuste $y = b_0 + xb_1$
3	1,4	$1{,}4 = b_0 + 3b_1$
4	1,5	$1{,}5 = b_0 + 4b_1$
5	2,2	$2{,}2 = b_0 + 5b_1$
6	2,4	$2{,}4 = b_0 + 6b_1$
8	3,1	$3{,}1 = b_0 + 8b_1$
9	3,2	$3{,}2 = b_0 + 9b_1$

AJUSTE POR MÍNIMOS QUADRADOS

Colocando como matrizes:

$$y = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} 1 & 1{,}4 \\ 1 & 1{,}5 \\ 1 & 2{,}2 \\ 1 & 2{,}4 \\ 1 & 3{,}1 \\ 1 & 3{,}2 \end{bmatrix}$$

Passo a passo, precisamos achar a transposta de **X**, que é $\mathbf{X^t}$, em seguida multiplicar pela própria matriz **X**, obtendo $\mathbf{X^tX}$. Em seguida, precisamos inverter o resultado, obtendo $\mathbf{(X^tX)^{-1}}$. Feito isto, precisamos fazer a multiplicação deste resultado pelo produto $\mathbf{X^ty}$. Precisamos determinar as matrizes $\mathbf{(X^tX)^{-1}}$ e $\mathbf{X^ty}$ e fazer a multiplicação dos resultados. Vamos por partes:

A transposta de **X**, ou seja, $\mathbf{X^t}$:

$$X^t = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1{,}4 & 1{,}5 & 2{,}2 & 2{,}4 & 3{,}1 & 3{,}2 \end{bmatrix}$$

Em seguida, fazemos o produto $\mathbf{X^tX}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1{,}4 & 1{,}5 & 2{,}2 & 2{,}4 & 3{,}1 & 3{,}2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1{,}4 \\ 1 & 1{,}5 \\ 1 & 2{,}2 \\ 1 & 2{,}4 \\ 1 & 3{,}1 \\ 1 & 3{,}2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 13{,}8 \\ 13{,}8 & 34{,}66 \end{bmatrix}$$

Agora, com este resultado, precisamos invertê-la $\mathbf{(X^tX)^{-1}}$:

$$\begin{bmatrix} 6 & 13,8 \\ 13,8 & 34,66 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,646 & -0,7866 \\ 0,788 & 0,342 \end{bmatrix}$$

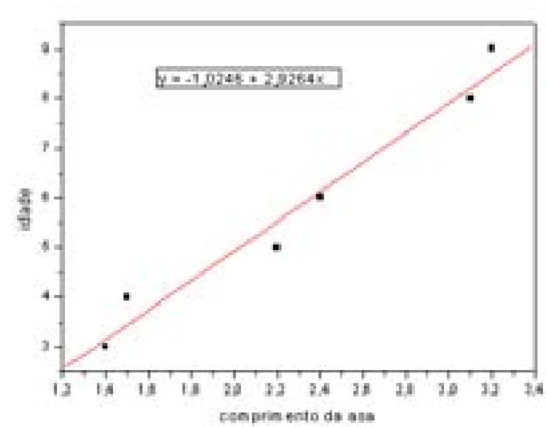
Agora reservamos este resultado e fazemos o produto $\mathbf{X^ty}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1,4 & 1,5 & 2,2 & 2,4 & 3,1 & 3,2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 35 \\ 89,2 \end{bmatrix}$$

Finalmente chegamos à etapa final, que é o produto $\mathbf{(X^tX)^{-1}.X^ty}$, que fornece uma matriz com os valores de b_o e b_1:

$$\begin{bmatrix} 1,646 & -0,7866 \\ 0,788 & 0,342 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 35 \\ 89,2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1,0246 \\ 2,9264 \end{bmatrix}$$

Para melhor visualização, temos abaixo o gráfico com a respectiva equação da reta, determinada pelo ajuste de mínimos quadrados:



ATIVIDADES

Como atividade, você deverá realizar o ajuste por mínimos quadrados para os demais dados da tabela que foi dada na última aula:

Idade x	C. Asas y	Ajuste $y = b_0 + xb_1$
11	3,9	$3{,}9 = b_0 + 11b_1$
12	4,1	$4{,}1 = b_0 + 12b_1$
14	4,7	$4{,}7 = b_0 + 14b_1$
15	4,5	$4{,}5 = b_0 + 15b_1$
16	5,2	$5{,}2 = b_0 + 16b_1$
17	5,0	$5{,}0 = b_0 + 17b_1$

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

comece escrevendo as matrizes X e y e realize as operações matriciais na ordem indicada no exemplo:

1. faça a transposta de X: (X^t)
2. multiplique o resultado por X: (X^tX)
3. inverta o resultado (ou seja, encontre a matriz inversa) $(X^tX)^{-1}$ e reserve este resultado;
4. multiplique a transposta de X (X^t) por y
5. multiplique o resultado da etapa 4 (X^ty) por $(X^tX)^{-1}$: deverá obter uma matriz de duas linhas e uma coluna, na qual os valores correspondem exatamente a β_o e β_1.

CONCLUSÃO

Como principal conclusão desta aula, destacamos que a partir da forma de uma equação de reta foi possível deduzir uma expressão matricial, a qual resume uma série de operações matriciais relativamente simples (talvez um pouco trabalhosas). Esta seqüência de operações nos permite determinar os parâmetros do modelo linear, a partir de um conjunto de dados experimentais.

Analisando dados experimentais, fotografia, autor desconhecido (Fonte: www.markelink.com)

RESUMO

Após esclarecermos o significado de ajustar dados a um modelo, nesta aula aplicamos especificamente o método de ajuste por mínimos quadrados para uma regressão linear.

Partimos da expressão da equação de uma reta, de forma geral $y = b_o + b_1x$ e deduzimos a operação matricial que nos permite determinar os parâmetros de interesse b_o e b_1: $b = (X^tX)^{-1}X^ty$. Esta equação dá a solução geral para o ajuste de um modelo por mínimos quadrados para o comportamento linear. Nesta equação, x e y são matrizes que contêm os dados experimentais e, de acordo com a equação, várias operações de transposição, inversão e multiplicação, deverão ser feitas, as quais são ilustradas passo a passo na aula. Inicialmente deve ser feita a transposta de X (X^t), cujo resultado deve ser multiplicado por X (X^tX). Em seguida, o resultado deve ser invertido $(X^tX)^{-1}$ e reservado. A transposta de X (X^t) deve ser multiplicada por y e o resultado (X^ty), multiplicado por $(X^tX)^{-1}$. Assim o resultado é uma matriz de duas linhas e uma coluna, na qual os valores correspondem exatamente a b_o e b_1, ou mais especificamente, b_o e b_1.

Este é um método poderoso - mas trabalhoso para o ajuste -, e atualmente muitas calculadoras científicas vêm programadas para realizar esta operação com grande rapidez. Caso você possua uma calculadora científica, poderá verificar no seu manual como esta operação deve ser realizada. Todavia, é desaconselhável que um experimentalista ignore completamente os fundamentos do método. Lembramos que a ciência avançou e muitos métodos e teorias que hoje são consagrados simplesmente não teriam sido propostos se os cientistas se dessem ao luxo de ignorar conhecimentos fundamentais.

OUTRAS OPERAÇÕES COM MATRIZES

Matriz transposta: fazer a transposta de uma matriz é reescrevê-la de modo que os elementos das linhas sejam posicionados em colunas.
Matriz inversa: toda matriz, quando multiplicada pela sua inversa, gera a matriz identidade (apenas com números 1 na diagonal principal, que vai do lado superior esquerdo ao inferior direito, e zeros nas outras posições). Para encontrar a matriz inversa, aplicam-se as regras da multiplicação da matriz original pela sua inversa (usando letras como elementos), tendo como resultado a matriz identidade. Em seguida, escrevendo-se sistemas de equações, encontram-se os valores das incógnitas na matriz inversa.

PRÓXIMA AULA

Caro aluno, na próxima aula estudaremos como podemos analisar o desempenho de um modelo, obtido por regressão em representar o comportamento dos dados, o que não pode ser feito de modo confiável apenas por um exame visual.

REFERÊNCIAS

BOX, G. E. P.; HUNTER, W. G.; HUNTER, J. S. **Statistics for experimenters. An introduction to design, data analysis and model building**. New York: Wiley, 1978.
BUSSAB, W. O.; MORETIN, P.A. Estatística básica, São Paulo, Ed. Atual, 1985.
BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. E.; BRUNS. R. E. Planejamento e otimização de experimentos Campinas Editora da Unicamp, 1995.