I.C.M.S.C.

INSTITUTO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS DE SÃO CARLOS

REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA ATRAVÉS DA MINIMIZAÇÃO
DA SOMA DOS DESVIOS ABSOLUTOS

Rosa Maria Paolillo Marcondes Talarico

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Gabriela Stangenhau

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SÃO CARLOS - SÃO PAULO
BRASIL

REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA ATRAVÉS DA MINIMIZAÇÃO
DA SOMA DOS DESVIOS ABSOLUTOS

Rosa Maria Paolillo Marcondes Talarico

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Gabriela Stangenhauß

Dissertação apresentada ao Instituto de
Ciências Matemáticas de São Carlos, da
Universidade de São Paulo, para a obten
ção do Título de Mestre em Ciências de
Computação e Estatística.

Class. -	T
Cutt. -	T 137 v
	c. 2
Tombo -	

SÃO CARLOS

1984

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

À Dr.^a Gabriela Stangenhauß pela segurança, compreensão e objetividade com que me orientou e pela permanente disponibilidade para discutir quaisquer aspectos de minhas atividades.

Ao Dr. Odelar Leite Linhares, pelo acompanhamento de minhas atividades desde o meu ingresso no Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos e pela amizade que demonstrou durante esses anos.

Ao Dr. Marcos Arenales, pelo auxílio na discussão e entendimento de um dos métodos utilizados neste trabalho.

Aos professores e funcionários do Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos, pela agradável convivência.

Aos colegas, pela amizade e incentivo.

Às bibliotecárias pela ajuda na obtenção e organização da bibliografia necessária para a elaboração deste trabalho.

À Lene pelo rápido e eficiente trabalho de datilografia.

À F.A.P.E.S.P. cujo auxílio através de bolsas, possibilitou a realização dos cursos de pós-graduação.

A Deus e aos amigos da corrente Paz, Amor e Fraternidade, pela força e coragem transmitidas em todos os momentos.

RESUMO

Este trabalho reúne informações a respeito do que tem sido pesquisado nos últimos anos sobre regressão no L_1 , com particular interesse nos aspectos associados à teoria dos métodos computacionais de programação linear.

Primeiramente, tem-se o problema de regressão no L_1 , sua relação com programação linear e as propriedades dos estimadores obtidos.

Em seguida, são apresentados os principais métodos até agora desenvolvidos para resolução desse problema, bem como um exemplo resolvido, para auxiliar não-especialistas a fazerem uso desses métodos.

Finalmente, foram feitas algumas aplicações para mostrar as vantagens e as desvantagens da utilização da técnica de regressão no L_1 .

SUMMARY

In this work we present results obtained in researches developed in the last few years on L_1 regression, with particular interest in the aspects related to the theory of the computational methods of linear programming.

Firstly, L_1 regression, its relation to linear programming and the property of the estimators are presented.

The most important algorithms developed as well as solved examples, are presented, in such a way that nonspecialists will be able to use them.

Finally, several problems were solved to point out the advantages and disadvantages of using L_1 regression.

I N D I C E

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO	1

CAPÍTULO II

REGRESSÃO NO L_1 VISTA COMO UM PROBLEMA DE PROGRAMAÇÃO <u>LI</u> NEAR	7
II.1. Introdução e Formulação do Problema	7
II.2. Definições e Propriedades	8

CAPÍTULO III

MÉTODOS UTILIZADOS PARA RESOLVER O PROBLEMA DE REGRESSÃO NO L_1	21
III.1. Introdução	21
III.2. Método de Karst (1958)	22
III.3. Método de Shah e Ramachandran	30
III.4. Método de Barrodale e Young (1966)	33
III.5. Método de P. D. Roberes e A. Ben-Israel (1969)	39
III.6. Método de Schlossmacker (1973)	59
III.7. Método de Barrodale e Roberts (1973)	61
III.8. Método de Nabih N. Abdelmalek (1975)	65
III.9. Método de Bloomfield e Steiger (1980)	74
III.10. Conclusões	81

CAPÍTULO IV

APLICAÇÕES	85
BILBIOGRAFIA	109

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Entre os métodos estatísticos disponíveis para análise de dados, um dos mais discutidos é a regressão. A teoria da regressão é utilizada para resolver problemas de aproximação de uma função a um conjunto de pontos dados.

Na tentativa de ajustar uma curva a um dado conjunto de pontos, procura-se a função que esteja mais próxima possível dos pontos. Usualmente, o tipo de função é sugerido por evidências empíricas ou argumentos teóricos. Começa-se com um modelo e deve-se analisá-lo para ver se está adequado.

Seja o problema de ajustar o modelo linear

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (I.1)$$

onde,

$X = [x_{ij}]$, $i = 1, \dots, N$; $j = 1, \dots, p$, denota um conjunto de N medidas de observações em p variáveis independentes.

$\beta = [\beta_j]$, $j = 1, \dots, p$, denota o vetor de parâmetros do modelo.

$Y = [y_i]$, $i = 1, \dots, N$, denota as medidas na variável dependente.

$\varepsilon = [\varepsilon_i]$, $i = 1, \dots, N$, denota os erros aleatórios.

Há diferentes métodos para estimação dos parâmetros desse modelo. A técnica mais amplamente divulgada para solucionar problemas de regressão é o método dos mínimos quadrados, conhecido pela sua simplicidade computacional e matemática, que consiste em aproximar uma função, baseado no critério de que a soma dos quadrados dos desvios verticais dos pontos à curva seja mínima.

Rice e White mostraram através de um estudo de Monte Carlo que, se os erros se afastarem da hipótese de normalidade e se sua distribuição tiver a cauda mais alongada do que a distribuição normal, o método de estimação no L_1 , que consiste em minimizar a soma dos valores absolutos dos erros, dá origem a estimadores com menor erro médio quadrático do que aqueles obtidos pelo método dos mínimos quadrados.

De acordo com Eisenhart, a minimização da soma dos desvios absolutos foi sugerida por Boscovich em meados do século XVIII, antes de Legendre (1805) propor o método dos mínimos quadrados. Boscovich, adicionou ao seu problema, a restrição de que a soma dos resíduos deve ser nula. Também descreveu um algoritmo para encontrar a inclinação da reta ótima que pode ser usada adicionando-se outras restrições tal como obter o intercepto igual a zero.

Em 1820, Fourier propôs um procedimento iterativo para minimizar a soma dos desvios absolutos que é semelhante ao método dos simplexos.

Edgeworth (1887) propôs a minimização da soma dos desvios absolutos sem restrições, mas as dificuldades computacionais fizeram com que nas décadas seguintes este método não fosse amplamente utilizado.

Com o desenvolvimento de programação linear e a demonstração de que a minimização da soma dos desvios absolutos pode ser formulada como um problema desse tipo, Wagner (1959) e diversos pesquisadores interessaram-se pelo assunto. O advento de computadores velozes e de grande porte eliminou as dificuldades computacionais que esse método apresentava.

O interesse por regressão no L_1 , regressão através da minimização dos desvios absolutos, tem aumentado nos últimos vinte anos com o desenvolvimento de métodos robustos. Durante esse período, foram feitas várias sugestões para o uso da metodologia de programação linear em problemas de estimação no L_1 . Esse critério alternativo para ajuste de um modelo foi tratado com uma imensa variedade de denominações: soma mínima de erros absolutos, desvios ou erros absolutos mínimos, critério no L_1 para minimização da norma no L_1 do vetor de erros e assim por diante; essa última denominação identifica o estimador como um membro da classe dos estimadores no L_p onde para $p = 2$ tem-se o método dos mínimos quadrados e para $p = \infty$, a estimação de Chebyshev.

O método dos mínimos quadrados é o mais utilizado por uma série de razões: poucos pesquisadores têm conhecimento que para certos desvios da hipótese de normalidade, a minimização da soma dos desvios absolutos é mais significativa do que os mínimos quadrados; raramente são apresentadas na literatura técnicas computacionais para determinar estimadores no L_1 ; os pesquisadores, em geral, relutam em utilizar critérios alternativos, se a distribuição dos testes estatísticos sobre os estimadores não pode ser determinada.

A regressão no L_1 é sabidamente menos sensível à presença de dados aberrantes do que o ajustamento obtido através do método dos mínimos quadrados. Quando a distribuição dos erros associada a um modelo linear é normal, o estimador de mínimos quadrados possui variância mínima. Independente da distribuição dos erros, o teorema de Gauss-Markov afirma que se os erros são homoscedásticos então o estimador de mínimos quadrados é o estimador linear não tendencioso de mínima variância. Entretanto, se não houver restrição à classe dos estimadores lineares é possível encontrar um estimador não linear que possua variância menor que o estimador de mínimos quadrados.

A estimação no L_1 vem ganhando uma grande preocupação por parte dos pesquisadores nos últimos anos e por esse motivo realizamos esse trabalho, cuja finalidade é reunir informações sobre o que tem sido pesquisado na área de regressão no L_1 , com particular interesse nos aspectos de regressão no L_1 associados à teoria dos métodos computacionais de programação linear.

No Capítulo II, definimos o problema de estimação no L_1 , sua relação com programação linear, bem como as propriedades dos estimadores obtidos.

No Capítulo III, apresentamos os principais métodos para resolução do problema de regressão linear no L_1 até agora desenvolvidos. Um problema - exemplo é resolvido após a apresentação de cada método, à título de ilustração e para auxiliar não-especialistas a fazerem uso desses métodos.

No Capítulo IV, fazemos algumas aplicações com o auxílio do "Statistical Analysis System" (S.A.S.), com a finalidade

de de ressaltar as vantagens e as desvantagens do uso da estima
ção no L_1 .

CAPÍTULO II

REGRESSÃO NO L_1 VISTA COMO UM PROBLEMA DE PROGRAMAÇÃO LINEAR

11.1. Introdução e Formulação do Problema

Segundo muitos autores, o problema de regressão no L_1 é na sua essência, um problema de programação linear; sob o critério no L_1 , pode-se determinar os coeficientes de regressão ótimos, formulando e resolvendo um problema de programação linear como foi mostrado por Charnes, Cooper e Ferguson (1955), Wagner (1959), Appa e Smith (1973), Barrodale e Roberts (1973), Sposito (1976) e outros.

A formulação de programação linear para o problema de estimação linear no L_1 , dá origem à derivação simples de algumas propriedades dos estimadores no L_1 , além de ser a base para alguns dos melhores algoritmos de estimação linear no L_1 .

Para ajustar o modelo linear (I.1), utilizando o método de minimização da soma dos desvios absolutos, estima-se o vetor β , através dos b_j que minimizam

$$\sum_{i=1}^N |y_i - \sum_{j=1}^P x_{ij} b_j|$$

Em particular, sejam u_i e v_i os desvios verticais a cima e abaixo do hiperplano ajustado $\hat{y} = \sum_{j=1}^P x_j b_j$, para o i-ésimo conjunto de observações.

Então, para cada i , têm-se,

$$\sum_j x_{ij} b_j + u_i - v_i = y_i$$

Por essa construção, $u_i + v_i$ é o desvio absoluto para a i -ésima observação, entre $\hat{y}$ e y_i .

Portanto, o problema pode ser facilmente formulado como um problema de programação linear, da forma

$$\min \sum_{i=1}^N (u_i + v_i) \quad (\text{II.1.1})$$

tal que

$$X\beta + Iu_i - Iv_i = Y$$

$$u_i, v_i \geq 0$$

onde I representa a matriz identidade de ordem N .

Associado a esse problema, tem-se o problema dual que é dado por:

$$\max f'Y \quad (\text{II.1.2})$$

tal que $X'f = 0$

$$-1 \leq f_i \leq 1 \quad (i = 1, 2, \dots, N).$$

Em alguns casos, dependendo do método utilizado para resolução do problema, a formulação dual é a mais apropriada para estabelecer uma condição suficiente para a estimação no L_1 , como veremos a seguir.

11.2. Definições e Propriedades

Os estimadores no L_1 nem sempre são únicos; no entanto, existe um número de propriedades que todos satisfazem. Entre elas estão a resistência à presença de dados aberrantes e às distribuições de erros com caudas alongadas. Muitas delas são

propriedades de programação linear, aplicadas ao problema proposto (II.1.1) que pode ser expresso por:

$$\min \sum_{i=1}^N (u_i + v_i) \quad (\text{II.2.1})$$

tal que

$$(u_i - v_i) + (b_0 + \sum_{j=1}^m x_{ij} b_j) = y_i$$

$$u_i, v_i \geq 0 \quad i = 1, 2, \dots, N$$

onde $m+1 = p$.

Seguem algumas definições e propriedades.

Definição 1

Qualquer (β, u, v) satisfazendo $X\beta + Iu - Iv = Y$ é denominada uma solução para (II.1.1).

Definição 2

Qualquer solução $\bar{w} = (\beta, u, v)$ para (II.1.1) que também satisfaz $\bar{w}_j \geq 0$ para $j = m+2, \dots, m+1+2N$ é denominada solução possível para o problema.

Definição 3

Qualquer solução possível $\bar{w}$ é chamada uma solução básica possível, se as colunas de $A = (X, I, -I)$ correspondentes a componentes diferentes de zero de $\bar{w}$, formam um conjunto de vetores linearmente independentes no R^n .

Definição 4

Um ponto $\bar{w} \in F = \{\bar{w} / A\bar{w} = Y, \bar{w}_j \geq 0, j = m+2, \dots, 2N+m+1\}$ é chamado um ponto extremo de F se não existem w_1 e $w_2 \in F$, $w_1 \neq w_2$, $0 < \lambda < 1$, tais que $\bar{w} = \lambda w_1 + (1 - \lambda)w_2$.

Definição 5

Qualquer $\bar{w} \in F$, que minimiza $c'\bar{w}$ (onde $c' = (0, e', e')$, $e' = (1, \dots, 1)_{1 \times N}$) é chamado uma solução ótima do problema e $X'\bar{w}$ é denominado hiperplano ótimo no L_1 .

Os teoremas abaixo relacionados são aplicações diretas de resultados de programação linear.

Teorema 1

O conjunto F é um conjunto convexo.

Teorema 2

Se $\bar{w} \in F$ é um ponto extremo então as colunas de A que correspondem a componentes não nulas de $\bar{w}$ são linearmente independentes.

Teorema 3

F contém um número finito de soluções básicas possíveis.

Teorema 4

Se F não é vazio, então o conjunto de pontos extremos de F , F^0 , também não é vazio.

Teorema 5

Se F é um poliedro convexo, então $c'\bar{w}$ atinge o mínimo em pelo menos um dos pontos extremos de F .

Teorema 6

Para qualquer solução possível de (II.1.1) e qualquer solução para o dual (II.1.2), tem-se:

$$Y'f \leq c'\bar{w}.$$

Teorema 7

Se $\bar{w}^*$ é possível para (II.1.1) e f^* é uma solução possível para o dual e $c'\bar{w}^* = Y'f^*$ então f^* é ótima para o dual e w^* é ótima para o primal.

Quando a matriz X tem posto completo, tem-se as seguintes propriedades associadas às soluções de (II.1.1):

Propriedade 1

No mínimo um hiperplano dando soma mínima dos desvios absolutos passa por $m+1$ dos N pontos.

Demonstração

Em (II.2.1) há N equações, $2N$ semi-espacos e $2N + m+1$ variáveis. Se um ponto não está em um hiperplano, tem-se que u_i ou v_i deve ser diferente de zero. Mas em um dos pontos extremos, $N + m+1$ das $2N$ variáveis não-negativas devem ser iguais a zero, de tal forma que, junto com as N equações, fique definido um ponto extremo. Segue então, que no máximo $N - (m+1)$ pontos estão fora do hiperplano correspondente a esse ponto extremo. $\square$

Propriedade 2

Uma solução para (II.2.1) é um hiperplano tal que a diferença absoluta entre o número de observações acima e abaixo do hiperplano, nunca excede $m+1$.

Demonstração

Essa propriedade é uma consequência do teorema da folga complementar: ou uma variável primal não-negativa assume valor zero, ou a restrição dual correspondente é satisfeita como uma igualdade.

Para o problema que está sendo considerado, tem-se:

$$(i) \quad u_i = 0 \quad \text{ou} \quad f_i = 1$$

$$(ii) \quad v_i = 0 \quad \text{ou} \quad f_i = -1$$

Se um ponto está acima do hiperplano ótimo, tem-se que $u_i > 0$ e $f_i = 1$ e se está abaixo, então $v_i > 0$ e $f_i = -1$. Supondo que existam N_1 pontos acima do hiperplano e N_2 abaixo e que, sem perda de generalidade, as observações no hiperplano ótimo tenham índices $1, 2, \dots, m+1$, então:

$$\sum_{i=1}^N f_i = 0 = N_1 - N_2 + \sum_{i=1}^{m+1} f_i$$

$$\Rightarrow |N_1 - N_2| = \left| \sum_{i=1}^{m+1} f_i \right| \leq m+1.$$

□

Essas duas propriedades implicam que a procura de um hiperplano ótimo pode ser restrita a um subconjunto de $\binom{N}{m+1}$ hiperplanos.

Propriedade 3

Para um dado conjunto de observações, se existem hiperplanos ótimos múltiplos no L_1 , então qualquer combinação convexa desses hiperplanos também é ótima no L_1 .

Demonstração

Seja $\bar{b}$ e $\tilde{b}$ dois vetores ótimos no L_1 e v o valor da soma dos desvios absolutos.

Seja $b^* = \alpha \bar{b} + (1-\alpha)\tilde{b}$, $\alpha \in [0,1]$.

Então,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N |y_i - \sum_{j=1}^{m+1} x_{ij} b_j^*| &= \sum_i (u_i^* + v_i^*) \\ &= \sum_i \alpha (\bar{u}_i + \bar{v}_i) + \sum_i (1-\alpha) (\tilde{u}_i + \tilde{v}_i) \\ &= \alpha v + (1-\alpha)v = v. \end{aligned}$$

Portanto, o hiperplano $Y = Xb^*$ também é ótimo no L_1 . $\square$

Propriedade 4

Qualquer solução extrema possível do problema dual associada a uma solução ótima do problema primal, é uma solução ótima.

Demonstração

Seja f^* uma solução extrema possível do problema dual associada a alguma solução ótima (β^*, u^*, v^*) do problema primal.

Multiplicando-se as restrições primais por f^* , tem-se:

$$f^{*'}(X\beta^* + Iu^* - Iv^*) = f^{*'}Y$$

Como f^* é uma solução possível do dual, então,
 $X'f^* = 0$. Tem-se então,

$$f^{*'}(Iu^* - Iv^*) = f^{*'}Y \quad (\text{II.2.2})$$

Se N_1 é o número de pontos acima do hiperplano e N_2 é o número de pontos abaixo desse hiperplano, tem-se que N_1 dos u_i^* e N_2 dos v_i^* são positivos e os restantes $u_i^* = v_i^* = 0$.

Pela natureza do problema, se $u_i^* > 0$ então $v_i^* = 0$ e $f_i^* = 1$ ou, se $v_i^* > 0$ então $f_i^* = -1$. Entretanto, pelo teorema da folga complementar, tem-se:

$$f^{*'}(Iu^* - Iv^*) = 1'Iu^* - 1'Iv^* = \sum_{i=1}^N u_i^* - v_i^*$$

(onde 1 é o vetor unidade)

Tem-se, em vista de (II.2.2) que os ótimos dos problemas primal e dual são iguais.

Então, pelo teorema da dualidade de programação linear, f^* e (β^*, u^*, v^*) são soluções ótimas. $\square$

Propriedade 5

Um hiperplano no L_1 que não passa por nenhum ponto observado tem $|N_1 - N_2| = 0$.

Demonstração

Suponha que $\hat{Y} = X'b$ é um hiperplano no L_1 que não passa por nenhum ponto observado e que $N_1 > N_2$.

Seja $D = \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{Y}|$.

Seja b^* um vetor cujos elementos são idênticos aos de b , exceto $b_1^* = b_1 + \varepsilon$ onde ε é um número positivo menor ou igual ao mínimo desvio positivo. Então,

$$\begin{aligned} D^* &= \sum_{i=1}^N |y_i - Y^*| = \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{Y} - \varepsilon| \\ &\leq \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{Y}| - (N_1 - N_2)\varepsilon < D \end{aligned}$$

Portanto, $\hat{Y}$ não é um hiperplano ótimo no L_1 . $\square$

Propriedade 6

Se o número de observações N é ímpar, então qualquer hiperplano ótimo no L_1 passa por pelo menos um ponto observado.

Demonstração

Segue imediatamente da Propriedade 5, pois se o hiperplano ótimo não passa por nenhum ponto observado, tem-se $|N_1 - N_2| = 0$ e como N é ímpar, isso não é possível.

Propriedade 7

Se N é ímpar e existem dois hiperplanos ótimos no L_1 que passam por $m+1$ pontos observados, então ambos hiperplanos têm um ponto observado em comum.

Demonstração

Suponha que os hiperplanos não têm um ponto em comum. Se os hiperplanos ótimos são paralelos, pode-se encontrar um hiperplano ótimo que é combinação linear desses dois e que não passa por nenhum ponto, contradizendo a Propriedade 6.

Se as retas não são paralelas e a intersecção delas não é um ponto comum, pode-se encontrar um hiperplano ótimo, combinação linear dos hiperplanos considerados, que não passa por qualquer ponto, contradizendo a Propriedade 6. $\square$

Propriedade 8

Nenhum ponto observado está entre dois hiperplanos ótimos no L_1 . (Estar "entre", significa ter um desvio positivo em relação a um hiperplano no L_1 , e um desvio negativo em relação a outro).

Demonstração

Sejam dois hiperplanos ótimos $Y = X'b$ (H_1) e $Y' = X'c$ (H_2) e suponha que exista um ponto observado (x_j, y_j) entre eles.

Existe um hiperplano que passa por (x_j, y_j) e que pode ser escrito como combinação convexa de H_1 e H_2 :

$$Y^* = \alpha X'b + (1-\alpha)X'c \quad (H_3)$$

Os outros pontos têm desvios positivos ou nulos com relação a H_1 ou negativos ou nulos com relação a H_2 .

Escrevendo a soma dos desvios absolutos em relação a H_3 , tem-se:

$$\begin{aligned} & \sum_{i \neq j} |y_i - [\alpha X'b + (1-\alpha)X'c]| \\ &= \sum_{i \neq j} |\alpha(y_i - X'b) + (1-\alpha)(y_i - X'c)| \\ &\stackrel{(A)}{=} \alpha \sum_{i \neq j} |y_i - X'b|^+ + (1-\alpha) \sum_{i \neq j} |y_i - X'c|^+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \alpha \sum_{i \neq j} |y_i - X'b| + (1-\alpha) \sum_{i \neq j} |y_i - X'c| \\
& = \alpha \sum_{i \neq j} |y_i - X'b| + (1-\alpha) \sum_{i \neq j} |y_i - X'c| \\
& < \alpha \sum |y_i - X'b| + (1-\alpha) \sum |y_i - X'c| \\
& \textcircled{B} \\
& = \sum |y_i - X'b| = \sum |y_i - X'c|
\end{aligned}$$

Tem-se $\textcircled{A}$ pelo fato dos desvios serem sempre tomados em módulo e serem positivos ou nulos com relação a H_1 ou negativos ou nulos com relação a H_2 , e $\textcircled{B}$ pelo fato dos dois hiperplanos H_1 e H_2 serem ótimos no L_1 .

Portanto, chega-se a um absurdo pois toda combinação convexa de hiperplanos ótimos também é ótima. $\square$

Para o caso em que a matriz X tem posto incompleto $r < N$, tem-se as seguintes propriedades cujas demonstrações seguem a linha dos casos anteriores:

Propriedade 1'

Existe um hiperplano ótimo no L_1 que passa pelo menos por r pontos.

Propriedade 2'

Seja n^* o número máximo de observações que estão em um hiperplano; então, qualquer hiperplano no L_1 é tal que a diferença absoluta entre o número de observações acima e abaixo do hiperplano não excede n^* .

As propriedades 3, 4, 5, 6, 8, também são válidas nesse caso.

Propriedade 7'

Se N é ímpar, há uma observação que está em todos os hiperplanos ótimos no L_1 .

Propriedade 9

Para o modelo linear simples, existem, no máximo, dois hiperplanos extremos que passam por uma observação dada (um hiperplano extremo no L_1 é aquele que passa por r pontos observados e por um número máximo de observações coplanares).

Demonstração

Considerando-se uma rotação de uma reta no L_1 através de um ponto dado, pela Propriedade 8, não é possível continuar a rotação depois de encontrar um outro ponto observado, tornando-se então, a reta de rotação nessa posição, uma reta extrema no L_1 . Portanto, tem-se que as duas direções de rotação dão somente duas retas extremas no L_1 . $\square$

Propriedade 10

No modelo linear simples, quando N é ímpar, há no máximo duas retas extremas no L_1 .

Propriedade 11

No modelo linear simples, existem no máximo, quatro retas extremas no L_1 .

Demonstração

Sejam os pontos acima de um hiperplano no L_1 denotados por N_1 e os abaixo desse hiperplano, denotados por N_2 .

Sejam duas retas extremas no L_1 , R_1 e R_2 .

Para o caso em que R_1 e R_2 são paralelas, supõe-se que todas as observações em R_1 sejam pontos N_1 e todas as observações em R_2 sejam pontos N_2 . Pela Propriedade 8, não pode haver outra reta extrema no L_1 paralela a R_1 e R_2 . Se existir uma terceira reta R_3 ela deve interceptar R_1 e R_2 de forma que todas as observações em R_1 permaneçam pontos N_1 e todas as observações em R_2 permaneçam pontos N_2 . Isso só ocorre se R_3 intercepta R_1 deixando todos os pontos N_1 de um lado e do outro, todos os pontos N_2 . Nenhuma outra reta extrema no L_1 pode interceptar R_1 e R_2 dessa forma; portanto a única possibilidade para uma quarta reta extrema no L_1 é a de uma reta que venha interceptar R_1 e R_2 do lado oposto ao de R_3 . Só existe uma reta nessas condições, totalizando então, quatro retas extremas no L_1 .

Se R_1 e R_2 não são paralelas, mas as observações que estão nelas estiverem todas do mesmo lado do ponto de intersecção, utiliza-se o mesmo argumento anterior. Caso contrário, as observações em R_1 e R_2 podem ser agrupadas em pontos N_1 e N_2 e a intersecção de qualquer outra reta extrema no L_1 com R_1 e R_2 deve estar entre os pontos N_1 e N_2 de R_1 e R_2 e novamente, tem-se quatro retas no máximo. $\square$

CAPÍTULO III

MÉTODOS UTILIZADOS PARA RESOLVER O PROBLEMA DE REGRESSÃO NO L_1

III.1. Introdução

Muitos autores notaram que sob o critério de estimação no L_1 , pode-se determinar os coeficientes de regressão ótimos, formulando e resolvendo um problema de programação linear; baseados nesse fato, foram desenvolvidos vários métodos para resolução desse problema, que fazem uso da estrutura especial da formulação de programação linear do problema no L_1 .

O primeiro a propor um procedimento iterativo para minimizar a soma dos desvios absolutos, semelhante ao método dos simplexos foi Fourier, em 1820; em 1887, Edgeworth considerou o mesmo problema.

Em 1940, Singleton mostrou uma técnica para regressão linear múltipla, que continha a essência do método dos simplexos.

Karst, em 1958, sugeriu um procedimento iterativo para estimar os parâmetros da reta de melhor ajuste, minimizando a soma dos desvios absolutos.

Nos anos mais recentes, vários métodos têm sido sugeridos para resolver o problema de estimação no L_1 ; muitos deles são obtidos combinando propriedades características de aproximação no L_1 com experiência adquirida em problemas de programação linear.

Em 1966, Barrodale e Young descreveram um algoritmo primal que usava a estrutura especial de formulação de programa

ção linear para o problema no L_1 .

Os problemas computacionais associados à estimação no L_1 , têm sido aliviados em grande parte pelo desenvolvimento de algoritmos eficientes como o de Barrodale e Roberts em 1972; em 1974, os autores publicaram um artigo com um programa em FORTRAN para esse algoritmo.

Schlossmacher, em 1973, mostrou que os estimadores de mínimos desvios absolutos podem ser encontrados por um processo iterativo de mínimos quadrados ponderados.

Em 1974, Abdelmalek apresentou um algoritmo dual simplex, aplicado a um problema de programação linear com variáveis limitadas não-negativas.

Em 1978, Bartels, Conn e Sinclair apresentaram um algoritmo que utiliza minimização de funções diferenciáveis por partes, para resolver o problema de estimação no L_1 .

Recentemente, em 1980, Bloomfield e Steiger mostraram um outro algoritmo para resolver o problema no L_1 , que apresenta um método eficiente para encontrar as substituições ótimas e um método heurístico para identificar o ponto a ser retirado.

Veremos, a seguir, uma descrição de alguns dos mais importantes métodos até agora desenvolvidos, aplicando cada método a um problema comum para ressaltar as principais diferenças e semelhanças entre eles.

III.2. Método de Karst (1958)

Esse método foi desenvolvido para determinar a reta de melhor ajuste para um conjunto de pontos, de tal forma que a soma dos valores absolutos dos desvios dos pontos à reta, seja mínima.

O problema é considerado, primeiramente com a restrição de que a reta passe por um ponto designado; nesse caso, com a

aplicação de um procedimento numérico obtém-se a solução que pode ser uma única reta ou um feixe de retas. Quando essa restrição é removida, é necessária a aplicação de um procedimento iterativo até encontrar-se a reta desejada.

Portanto, para o problema com a restrição de que a reta passe através de um ponto (X_p, Y_p) , não necessariamente pertencente ao conjunto de pontos dados, tem-se:

$$\begin{cases} x = X - X_p \\ y = Y - Y_p \end{cases}$$

e o problema restrito é: dados os pontos $\{(x_i, y_i), i = 1, \dots, N\}$ encontrar a reta $y_i = x_i \bar{\beta}$ tal que $S = \sum_{i=1}^N |y_i - \bar{y}_i|$ seja mínima.

O gráfico de S é um polígono aberto, convexo, onde a inclinação de cada segmento de reta é a soma algébrica das inclinações das retas que o compõem; o polígono tem as seguintes propriedades:

- (1) A inclinação do segmento na extrema esquerda é $-\sum_{i=1}^N |x_i|$ e a do segmento na direita é $\sum_{i=1}^N |x_i|$.
- (2) Os vértices de S são localizados diretamente acima dos pontos mínimos $(y_i/x_i, 0)$ das curvas de suas componentes individuais.
- (3) A inclinação de S aumenta de $2|x_i|$ a cada vértice, da esquerda para a direita.

Portanto, dessas propriedades, tem-se o procedimento para localizar o mínimo de S :

- (a) ordena-se os y_i/x_i em ordem crescente;
- (b) para $-\sum_{i=1}^N |x_i|$ soma-se valores sucessivos de $2|x_i|$ até obter-se uma mudança de sinal em $i = r$, que significa o ponto mínimo de S , pois ele indica uma mudança na inclinação de S de negativa para positiva;
- (c) o mínimo está diretamente acima do ponto $(y_r/x_r, 0)$. Então $b = y_r/x_r$ é o valor de b para o qual S é mínima.

O gráfico (S, b) cujo ponto mínimo dá o valor de b da reta de melhor ajuste pode ter um segmento horizontal mínimo, o que corresponde a um feixe de retas; essas retas têm a propriedade de que a soma dos valores absolutos dos desvios dos pontos é uma constante e é menor que a soma correspondente à qualquer reta não incluída no feixe, isto é, com b fora do intervalo.

Quando a restrição de que a reta passe através de um ponto (X_p, Y_p) é retirada, torna-se necessário encontrar os parâmetros da reta $Y = X\beta + a$ tal que $S = \sum_{i=1}^N |Y_i - bX_i - a|$ seja mínima.

Então, no espaço (S, b, a) , deve-se encontrar valores de b e a que tornem S mínima. Desde que a superfície é uma superposição de semi-planos da forma $S_i = |Y_i - bX_i - a|$, ela é um poliedro.

Usa-se um dos pontos do conjunto $\{X_i, Y_i\}$, por exemplo (X_1, Y_1) como ponto de referência para que a reta passe por ele. A reta $Y_1 - bX_1 - a = 0$ está associada a esse ponto no plano (b, a) . Considera-se o plano vertical $Y_1 - bX_1 - a = 0$, no

espaço (S, b, a) que intercepta o poliedro convexo S em um polígono convexo cujo ponto mínimo (S_1, b_1, a_1) é associado à solução analítica igual à obtida anteriormente usando (X_1, Y_1) como ponto escolhido. Entretanto, esse mínimo é relativo a (X_1, Y_1) e não é o mínimo absoluto do poliedro S .

A reta de mínimo local através de (X_1, Y_1) deve passar no mínimo através de um outro ponto (X_r, Y_r) .

Tem-se que se S é mínima para $b = y_r/x_r$, a equação da reta de melhor ajuste para o caso restrito é

$$Y' - Y_p = \left(\frac{y_r}{x_r}\right)(X - X_p)$$

que também pode ser escrita usando a inclinação $\frac{y_r}{x_r} = \frac{Y_r - Y_p}{X_r - X_p}$ e portanto, tem-se que $Y' - Y_p = \frac{Y_r - Y_p}{X_r - X_p}(X - X_p)$ contém o ponto (X_r, Y_r) . Tem-se, então, o seguinte processo iterativo:

- (a) Escolhe-se um ponto (X_1, Y_1) dos dados e determina-se a reta de mínimo local associada $Y = b_1X + a_1$.
- (b) Essa reta passa pelo menos por um outro ponto (X_2, Y_2) observado. Usando (X_2, Y_2) como ponto de referência, acha-se a reta de mínimo local $Y = b_2X + a_2$ com $S_2 < S_1$.
- (c) Essa reta passa através de um outro ponto de referência (X_3, Y_3) observado, e determina-se $Y = b_3X + a_3$ com $S_3 < S_2 < S_1$.
- (d) Esse procedimento é repetido até que um ponto (X_t, Y_t) forneça uma reta de mínimo local $Y = b_tX + a_t$ que não passe por um novo ponto observado (X_{t+1}, Y_{t+1}) . Es

sa reta $\hat{e}$, então, a reta que minimiza a soma dos desvios absolutos.

Esse processo iterativo leva a um mínimo absoluto de S .

Seja a figura (III.2.1) abaixo que mostra o primeiro ponto do procedimento iterativo (X_1, Y_1) e um feixe de retas passando por ele; uma delas com parâmetros (b_1, a_1) é a reta de mínimo local e passa por (X_2, Y_2) .

FIGURA (III, 2.1)

Seja agora a figura (III.2.2), que mostra o espaço (S, b, a) .

FIGURA (III, 2.2)

O feixe de retas da figura (III.2.1) é associado à reta $Y_1 - bX_1 - a = 0$ no plano (b, a) da figura (III.2.2). Cada reta do feixe que passa por (X_1, Y_1) corresponde a um ponto em $Y_1 - bX_1 - a = 0$. Em particular, o mínimo local por (X_1, Y_1) e (X_2, Y_2) corresponde a um ponto $P_1 = (b_1, a_1)$.

O traço do plano vertical $Y_1 - bX_1 - a = 0$ no poliedro S é o polígono s_1 . Diretamente sobre P_1 está P'_1 e o segmento $P_1P'_1$ é S_1 que é a soma mínima dos desvios absolutos associada a (X_1, Y_1) . O ponto P'_1 é o mínimo do polígono

no s_1 , mas não é necessariamente o mínimo de S .

O segundo ponto (X_2, Y_2) dos dados também terá um feixe de retas passando por ele e que corresponde à reta $Y_2 - bX_2 - a = 0$ no plano (b, a) na figura (III.2.2). Os dois feixes têm uma reta em comum que é a reta de mínimo local por (X_1, Y_1) ; então as retas correspondentes no plano (b, a) interceptarão em P_1 .

Correspondendo ao plano $Y_2 - bX_2 - a = 0$ tem-se o seu traço no poliedro S , que é o polígono s_2 , que tem seu mínimo em P'_2 diretamente acima de P_2 . Então $P_2P'_2$ é S_2 que é o mínimo local associado a (X_2, Y_2) .

Se S_1 não é o mínimo absoluto de S , então P'_1 não pode ser o mínimo do polígono s_2 , pela convexidade de S . Então o mínimo local S_2 associado a (X_2, Y_2) , em geral estará acima de algum ponto (b_2, a_2) e será menor que S_1 .

De forma semelhante, se S_2 não é o mínimo absoluto, o traço S_3 associado a (X_3, Y_3) terá um mínimo local S_3 , tal que $S_3 < S_2 < S_1$.

Somente quando a iteração localizar o mínimo absoluto de S , ela irá terminar, voltando ao ponto de referência anterior. O processo terminará no mínimo absoluto, pois isso implica uma região mínima do poliedro S e devido à sua convexidade, essa região é única.

Sadowski escreveu um programa para esse algoritmo em 1974. Observou que em mil experimentos simulados foram ajustadas retas para as quais foram necessárias, em média, três iterações quando $N = 10$ e quatro iterações quando $N = 50$.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Escolhe-se o primeiro ponto como referência. Então,

tem-se:

X_i	Y_i	x_i	y_i	y_i/x_i	ordem
1	7/2	0	0	∞	0
2	1	1	-5/2	-5/2	1
3	9/2	2	1	1/2	4
4	3	3	-1/2	-1/6	3
5	5	4	3/2	3/8	5
6	2	5	-3/2	-3/10	2

$$-\sum_{i=1}^6 |x_i| = -15$$

$$2|1| = \frac{2}{-13}$$

$$2|5| = \frac{10}{-3}$$

$$2|3| = \frac{6}{3}$$

O próximo ponto de referência é (4,3)

Então, tem-se:

X_i	Y_i	x_i	y_i	y_i/x_i	ordem
1	7/2	-3	1/2	-1/6	3
2	1	-2	-2	1	4
3	9/2	-1	3/2	-3/2	1
4	3	0	0	∞	6
5	5	1	2	2	5
6	2	2	-1	-1/2	2

$$-\sum_{i=1}^6 |x_i| = -9$$

$$2|-1| = \frac{2}{-7}$$

$$2|2| = \frac{4}{-3}$$

$$2|-3| = \frac{6}{3}$$

O próximo ponto de referência é $(1, 7/2)$,
que já foi o primeiro ponto de referência.

Então, a reta ótima foi encontrada e é:

$$(y - 7/2) = -\frac{1}{6}(x - 1) \quad \text{ou} \quad y = \frac{22}{6} - \frac{1}{6}x.$$

III.3. Método de Shah e Ramachandran (1960)

Esse método segue essencialmente as idéias de Karst, utilizando argumentos algébricos. Dessa forma é possível generalizar os resultados para ajustar parábolas, exponenciais, e outras curvas.

O problema é considerado primeiramente com a restrição de que a reta desejada passe através de um ponto (X_p, Y_p) não necessariamente pertencente ao conjunto de pontos dados. Tem-se então:

$$\begin{cases} x = X - X_p \\ y = Y - Y_p \end{cases}$$

e o problema transforma-se em ajustar uma reta $y = bx$ tal que

$$S = \sum_{i=1}^N |y_i - bx_i| \quad \text{seja mínima.}$$

$$\text{Então, } S = \sum_{i=1}^N |x_i| |u_i - b| \quad \text{onde } u_i = \frac{y_i}{x_i}.$$

Se $f_i = \frac{|x_i|}{\sum |x_i|}$, $\sum_{i=1}^N f_i = 1$, tem-se que minimizar $\sum_{i=1}^N f_i |u_i - b|$ com relação a b , que é o primeiro momento absoluto em torno de b da distribuição de u com frequências $f_1, \dots, f_N$. Tem-se um mínimo quando b for a mediana da distribuição de u .

Então

$$b = u_{\text{mediano}}$$

$$y = u_{\text{mediano}} x \text{ ou}$$

$$Y = Y_p + u_{\text{mediano}}(X - X_p),$$

é a equação da reta desejada.

Para o caso de ajustar uma reta sem restrição, tem-se $Y = a + bX$ tal que $S = \sum_{i=1}^N |Y_i - a - bX_i|$ seja mínima.

$$\text{Faz-se } s = c \sum_{i=1}^N f_i |u_i - b| \quad (A)$$

$$= \sum_{i=1}^N |v_i - a| \quad (B)$$

$$\text{onde } f_i = \frac{|X_i|}{c}, \quad u_i = \frac{Y_i - a}{X_i}, \quad v_i = Y_i - bX_i \text{ e}$$

$c = \sum_{i=1}^N |X_i|$. Para achar os valores de a e b tal que S seja mínima usa-se o seguinte processo iterativo:

- (1) Toma-se um valor de a e usando (A), determina-se b como a mediana da distribuição de u .
- (2) Com esse valor, acha-se a mediana de v .

Continua-se o processo até que dois valores consecutivos de a e b coincidam.

Quando a mediana não é univocamente determinada, pode-se usar qualquer valor mediano. Tomando-se o limite inferior do intervalo que fornece as medianas obtém-se o resultado de Karst.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Escolhendo o valor inicial $a = 4,0$, obtém-se os u_i :

$$u_i = (-0,5; -1,5; 0,166; -0,25; 0,2; -0,333)$$

Uma mediana para esse conjunto é $-0,25$, que é usada como valor de b para encontrar os v_i :

$$v_i = (3,75; 1,5; 5,25; 4,0; 6,25; 3,5)$$

Uma mediana para esse conjunto é $3,75$ que é usada como novo valor de a , para encontrar os próximos valores para u_i , de forma análoga à anterior. Os valores obtidos são mostrados no quadro abaixo:

iteração	valores de	
	a	b
1	4,0	-0,25
2	3,75	-0,187
3	3,687	-0,171
4	3,671	-0,167
5	3,667	-0,166
6	3,666	-0,166
7	3,666	-0,166

Portanto, a reta desejada é

$$y = 3,666 - 0,166x$$

III.4. Método de Barrodale e Young (1966)

O método de Barrodale e Young é uma modificação do método simplex, explorando a estrutura da formulação do problema através de programação linear (II.2.1) que fornece, de imediato, uma base inicial para o método simplex.

Para garantir a não-negatividade de β , faz-se

$$b_{m+1} = \max(0, -\min \beta_j) \quad \text{e} \quad b_j = \beta_j + b_{m+1} \quad \text{para} \quad 1 \leq j \leq m.$$

Define-se:

$$\begin{aligned} e_i &= \sum_{j=1}^m b_j x_{ji} - b_{m+1} \sum_{j=1}^m x_{ji} - y_i \\ &= b_1 x_{1,i} + \dots + b_m x_{m,i} + b_{m+1} x_{m+1,i} - y_i \end{aligned}$$

$$\text{onde} \quad x_{m+1,i} = - \sum_{j=1}^m x_{ji} \quad \text{para} \quad 1 \leq i \leq N.$$

Faz-se $e_i = u_i - v_i$ onde $u_i \geq 0$, $v_i \geq 0$, e tem-se N restrições em variáveis não-negativas:

$$y_i = b_1 x_{1,i} + \dots + b_{m+1} x_{m+1,i} - u_i + v_i \quad 1 \leq i \leq N$$

O problema de aproximação no L_1 é encontrar $\{\beta_j\}$ tais que $\sum_{i=1}^N |e_i|$ seja mínima; isso é obtido resolvendo o problema de programação linear:

$$\min \sum_{i=1}^N (u_i + v_i)$$

$$\text{tal que} \quad y_i = b_1 x_{1,i} + \dots + b_{m+1} x_{m+1,i} - u_i + v_i \quad 1 \leq i \leq N$$

$$u_i \geq 0$$

$$v_i \geq 0.$$

O problema pode ser apresentado em um quadro simplex da seguinte forma:

CUSTOS			0	0	0	1	1	1	1			
	Base	R	b_1	b_2	...	b_{m+1}	u_1	...	u_N	v_1	...	v_N
1	v_1	y_1	x_{11}	x_{21}	...	$x_{m+1,1}$	-1	0		1	0	
⋮	⋮	⋮	x_{12}	x_{22}	...	$x_{m+1,2}$	0	0		0	⋮	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	
1	v_N	y_N	x_{1N}	x_{2N}	...	$x_{m+1,N}$	0	-1		0	1	
CUSTOS MARGINAIS		Σy_i	Σx_{1i}	Σx_{2i}	...	$\Sigma x_{m+1,i}$	-2	...	-2	0	...	0

Esse quadro é condensado armazenando-se somente as colunas R e b_j para $j = 1, \dots, m+1$; esses $m+2$ vetores são suficientes para a aplicação do método dos simplexos. Se todos y_i forem maiores ou iguais a zero, uma base inicial é $\{v_1, \dots, v_N\}$ e a cada passo $u_i = -v_i$; portanto, se v_i estiver na base, u_i deve estar fora dela e não precisa ser armazenado. Observa-se também que a soma dos custos marginais de u_i ou v_i é sempre igual a -2 , podendo-se deduzir sempre um custo marginal a partir do outro.

Se algum y_i for menor que zero, divide-se a linha correspondente por -1 e substitue-se o v_i da base inicial pelo u_i correspondente. As transformações realizadas são as mesmas utilizadas pelo método simplex.

Existe uma versão modificada do algoritmo de Barrodale e Young, proposta por Kiountouzis (1973), em que na maioria dos casos o número de iterações necessária para obter uma solução ótima pode ser reduzido. Em particular, na modificação de Kiountouzis, o pivô é selecionado como a mediana dos quocientes posi

tivos ao invés de se escolher o mínimo dos quocientes positivos.

À primeira vista, o método de Kiountouzis é muito bom, mas há exemplos que demonstram que não há garantia de convergência, isto é, pode ocorrer circularidade.

Pode-se citar um exemplo como ilustração desse fato: seja o seguinte conjunto de pontos:

x	0,5	2	3	4	5
y	0,583	1,746	2,733	3,683	5,494

Tem-se então, o seguinte quadro condensado, onde:

- os rótulos $1, 2, \dots, 5$ são usados para $v_1, \dots, v_5$, e $-1, -2, \dots, -5$ pra $u_1, \dots, u_5$;
- a última coluna corresponde aos elementos da base;
- o número que aparece no lado direito dentro de um quadrado é o número da iteração;
- os números que aparecem dentro de um círculo são os números das colunas.

0,583	1	1/2	-3/2	1
1,746	1	2	-3	2
2,733	1	3	-4	3
3,683	1	4	-5	4
5,494	1	5	-6	5
	⑥	⑦	⑧	⑩
	5	29/2	-39/2	

0,123	7/8	-1/8	-7/8	1
0,095	-1/2	1/2	1/2	-2
0,028	-1/4	3/4	1/4	-3
0,921	1/4	1/4	-5/4	7
0,891	-1/4	-5/4	1/4	5
	⑥	④	⑧	1
	-1/8	-9/8	1/8	

0,288	0	3/4	7/4	1
0,190	-1	1	2	8
0,019	0	-1/2	1/2	3
1,158	-1	3/2	5/2	7
0,843	0	-3/2	-1/2	5
	⑥	④	②	2
	0	-9/4	3/4	

0,123	7/8	-1/8	-7/8	1
0,095	-1/2	1/2	1/2	-2
0,028	-1/4	3/4	1/4	-3
0,921	1/4	1/4	-5/4	7
0,891	-1/4	-5/4	1/4	5
	⑥	④	⑧	3
	-1/8	-9/8	1/8	

Observa-se que a tabela 3 é idêntica à tabela 1 ;
portanto o algoritmo circulou.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Tem-se, então, as seguintes tabelas condensadas:

7/2	1	1	-2	1
1	1	2	-3	2
9/2	1	3	-4	3
3	1	4	-5	4
5	1	5	-6	5
2	1	6	-7	6
	⑦	⑧	⑨	⑩
	6	21	-27	

19/6	5/6	-1/6	-5/6	1
1/3	2/3	-1/3	-2/3	2
7/2	1/2	-1/2	-1/2	3
5/3	1/3	-4/6	-1/3	4
10/3	1/6	-5/6	-1/6	5
2/6	1/6	1/6	-7/6	8
12	⑦	⑥	⑨	①
	5/2	-7/2	-5/2	

33/12	-5/4	1/4	0	1
1/2	3/2	-1/2	-1	7
13/4	-3/4	1/4	0	3
3/2	-1/2	-1/2	0	4
39/12	-1/4	-3/4	0	5
1/4	-1/4	1/4	-1	8
129/12	②	⑥	⑨	2
	-1/4	-7/4	0	

3/2	-5	-1	5	1
2	6	1	-7	7
5/2	-3	-1/2	3	3
1	-2	-1	2	4
3	-1	-1	1	5
1	4	1	-4	-2
9	⑧	⑥	⑨	3
	0	-5/2	7	

13/10	-1	-1/5	1/5	9
41/10	-1	-2/5	7/5	7
8/5	0	1/10	-3/5	3
2/5	0	-3/5	-2/5	4
27/10	0	-4/5	-1/5	5
11/5	0	1/5	4/5	2
89/10	⑧	⑥	①	4
	0	-21/10	-7/5	

1/6	-1	-1/3	1/3	9
115/30	-1	-2/3	5/3	7
5/3	0	1/6	-2/3	3
2/3	0	5/3	-2/3	6
-11/6	0	-4/3	1/3	5
7/3	0	1/3	2/3	-2
17/6	⑧	④	①	⑤
	0	-1/6	-4/3	

A solução obtida é

$$y = \alpha_1 - \alpha_3(1 + x) = \frac{22}{6} - \frac{1}{6}x$$

III.5. Método de P. D. Robers e A. Ben-Israel (1969)

Robers e Ben-Israel aplicaram um novo método dual de programação linear para a formulação dual do problema no L_1 . Seu novo método, chamado de programação linear intervalar resolve problemas de programação linear com variáveis limitadas, utilizando substituições múltiplas.

Esse método é baseado em um método de subotimização para programação linear intervalar, o SUBOPT, desenvolvido pelos mesmos autores, que resolve um problema de programação intervalar à cada iteração.

Primeiramente, tem-se que um problema de programação intervalar (P.I. ou P.I.(y, c^-, B, c^+)) é da forma:

$$\text{maximizar } y^t z \quad (\text{III.5.1})$$

$$\text{tal que } c^- \leq Bz \leq c^+ \quad (\text{III.5.2})$$

onde a matriz B e os vetores y, c^-, c^+ são dados.

Um P.I. pode ser resolvido pelos métodos usuais de programação linear, mas os métodos especiais são melhores pois ao converter um P.I. em um problema de programação linear na forma padrão, pode-se aumentá-lo consideravelmente. Portanto, o SUBOPT pode ser visto como um método alternativo para programação linear.

Tem-se que qualquer $z \in R^n$ satisfazendo (III.5.2) é uma solução possível para o P.I.; quando não existe $z \in R^n$ que satisfaz (III.5.2) diz-se que o P.I. é impossível. Um P.I. é limitado se é possível e $\max\{y^t z : z \text{ possível}\}$ é finito, ou seja, se suas soluções ótimas formam um conjunto limitado.

O seguinte lema, caracteriza os P.I. quando limitados:

Lema 1

Um P.I. (y, c^-, B, c^+) possível é limitado se e somente se $y \in [N(B)]^\perp$, onde:

$N(B) = \{z \in R^n \text{ tal que } Bz = 0\}$ é o espaço nulo de B .

$[N(B)]^\perp = \{y : x \perp y, \text{ para todo } x \in N(B)\}$ é o complemento ortogonal de $N(B)$.

$R(B) = \{y \in R^m : y = Bx \text{ para todo } x \in R^n\}$ é a imagem de B .

Prova

($\Rightarrow$) Supõe-se que $y \in [N(B)]^\perp$ e do fato conhecido que $R(B^t) = [N(B)]^\perp$, tem-se que $y \in R(B^t)$ e portanto existe $w \in R^m$ tal que $B^t w = y$, ou $w^t B = y^t$.

Portanto $\max y^t z = \max w^t Bz$.

Como $c^- \leq Bz \leq c^+$, tem-se que

$$\max_i \sum_i w_i^t Bz \leq \sum_{w_i > 0} w_i^t c_i^+ + \sum_{w_i < 0} w_i^t c_i^- < \infty.$$

Portanto, o máximo de $y^t z$ é finito e P.I. (y, c^-, B, c^+) é limitado.

($\Leftarrow$) Supõe-se, por absurdo, que $y \notin [N(B)]^\perp$.

Seja $\hat{z}$ uma solução possível do P.I.

Então $z = \hat{z} + \lambda z'$ também é uma solução possível do P.I., onde $z' \in N(B)$. Então $y^t z = y^t \hat{z} + \lambda y^t z'$ e como $y^t z'$ é necessariamente diferente de zero, pode-se fazer λ tender a $+\infty$ ou $-\infty$, conforme o valor de $y^t z'$ seja maior que zero ou menor que zero. Portanto, o P.I. é ilimitado, e isso é um absurdo. Portanto, $y \in [N(B)]^\perp$, necessariamente.

Lema 2

Seja $B \in R_r^{m \times n}$, $E \in R_m^{m \times m}$ e $P \in R^{n \times n}$, uma matriz de permutação, tal que

$$EB = \begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix} P$$

Então, as colunas da matriz $n \times (n-r)$,

$$N = P^t \begin{bmatrix} -\Delta \\ I_{n-r} \end{bmatrix}$$

formam uma base para $N(B)$.

Prova

Deve-se mostrar que a matriz $N \in N(B)$ e que o posto por coluna de N é igual ao posto de $N(B)$.

Tem-se que:

$$EB = \begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix} P$$

então $B = E^{-1} \begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix} P$

e $BN = E^{-1} \begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix} PP^t \begin{bmatrix} -\Delta \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = 0 .$

Portanto $N \in N(B)$.

Tem-se que o posto de $N(B)$ é $n-r$ e que

$$EBP^{-1} = \begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix} .$$

Então as matrizes B e

$$\begin{bmatrix} I_r & \Delta \\ \dots & \dots \\ 0_{(m-r) \times n} \end{bmatrix}$$

são equivalentes e de posto r .

Como P^t é não-singular, tem-se que

$$\text{posto} \left[P^t \begin{bmatrix} -\Delta \\ I_{n-r} \end{bmatrix} \right] = \text{posto} \begin{bmatrix} -\Delta \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = n-r .$$

Portanto, tem-se um conjunto de $n-r$ vetores linearmente independentes que formam uma base de $N(B)$. $\square$

Os dois lemas seguintes são usados para converter um P.I. em um P.I. equivalente, com a matriz de posto completo por coluna.

Lema 3

Seja $B \in R_r^{m \times n}$, $D \in R_r^{r \times n}$ tal que

$$R(D^t) = R(B^t) \quad (\text{III.5.3})$$

Então $BD^t \in R_r^{m \times r}$, isto é, BD^t é de posto completo por coluna.

Prova

Escolhe-se D como sendo a máxima submatriz, de B de posto completo por linha, e tem-se que BD^t tem posto completo por coluna. $\square$

Lema 4

Seja P.I. (y, c^-, B, c^+) dado com $y \in [N(B)]^\perp$, $B \in R_r^{m \times n}$, $D \in R_r^{r \times n}$ satisfazendo (III.5.3). Então as soluções ótimas do P.I. são da forma

$$D^t x^* + N(B)$$

onde x^* é uma solução ótima do P.I. (Dy, c^-, BD^t, c^+) .

Prova

Dos fatos de $y \in [N(B)]^\perp$ e $R(B^t) = [N(B)]^\perp$ tem-se que as soluções ótimas do P.I. são da forma $z^* + N(B)$, onde z^* é uma solução ótima de

$$\max y^t z \quad (III.5.4)$$

$$\begin{aligned} \text{tal que } c^- \leq Bz \leq c^+ \\ z \in R(B^t) \end{aligned} \quad (III.5.5)$$

Como $R(D^t) = R(B^t)$ então $z \in R(B^t)$ é equivalente a $z = D^t x$, $\forall x \in R^r$.

Então, substituindo $z = D^t x$ em (III.5.4) e (III.5.5), tem-se o resultado. $\square$

Usando o Lema 4, é possível substituir P.I. (y, c^-, B, c^+) por P.I. (Dy, c^-, BD^t, c^+) equivalente, cuja matriz de coeficientes BD^t é de posto completo por coluna.

Um Problema Auxiliar

Seja o problema auxiliar (P.A.),

$$\max y^t z \quad (III.5.6)$$

$$\text{tal que } d^- \leq Fz \leq d^+ \quad (III.5.6.1)$$

$$g^- \leq hz \leq g^+ \quad (III.5.6.2)$$

onde $F \in R_r^{n \times r}$, $h \in R^{1 \times r}$ e $\begin{pmatrix} d^- \\ g^- \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} d^+ \\ g^+ \end{pmatrix}$.

Substituindo-se $x = Fz$, tem-se

$$\max y^t F^{-1} x \quad (III.5.7)$$

$$\text{tal que } d^- \leq x \leq d^+ \quad (III.5.7.1)$$

$$g^- \leq hF^{-1} x \leq g^+ \quad (III.5.7.2)$$

P.A. é possível se e somente se (III.5.7), (III.5.7.1.), (III.5.7.2) é possível e as soluções ótimas do P.A. são da forma $z^* = F^{-1}x^*$ onde x^* é uma solução ótima de (III.5.7), (III.5.7.1), (III.5.7.2).

Para resolver o P.A. através do problema equivalente, tem-se:

Observações

- (1) As soluções ótimas x^0 do subproblema (III.5.7) são

da forma:

$$x_i^0 = \begin{cases} d_i^+ & \text{se } (y^t F^{-1})_i > 0 \\ d_i^- & \text{se } (y^t F^{-1})_i < 0 \\ \theta_i d_i^+ + (1-\theta_i) d_i^- & \text{se } (y^t F^{-1})_i = 0 \end{cases} \quad (\text{III.5.8})$$

onde $0 \leq \theta_i \leq 1$ é arbitrário.

- (2) Se $g^- \leq hF^{-1}x^0 \leq g^+$, então x^0 é uma solução ótima de (III.5.7).

- (3) Se P.A. é possível e (III.5.8) não satisfaz (III.5.7.2) com $hF^{-1}x^0 > g^+$, há uma solução ótima x^* de (III.5.7) que satisfaz $hF^{-1}x^* = g^+$. Assume-se, sem perda de generalidade que x^0 satisfaz (III.5.7.2) ou a desigualdade $hF^{-1}x^0 > g^+$ é violada, pois se $hF^{-1}x^0 < g^-$ a desigualdade é equivalente a $-hF^{-1}x^0 > -g^-$ e então redefine-se hF^{-1} e g^- de maneira óbvia. Seja $\Delta = g^+ - hF^{-1}x^0$ a quantidade pela qual a restrição (III.5.7.2) é violada em x^0 .

Por (1), tem-se que as componentes x_i^0 que podem ser modificadas para tornar (III.5.7.2) possível (mantendo (III.5.7.1) possível) são aquelas indexadas por:

$$Q = \{i : 1 \leq i \leq r, (hF^{-1})_i \neq 0, \gamma_i = \frac{(y^t F^{-1})_i}{(hF^{-1})_i} \geq 0\}$$

Reordena-se os índices de Q (em número de q) por:

$Q = \{k_1, k_2, \dots, k_q\}$, onde

$$\gamma_{k_1} \leq \gamma_{k_2} \leq \dots \leq \gamma_{k_q} \quad \text{e} \quad k_i < k_{i+1} \quad \text{se} \quad \gamma_i = \gamma_{i+1}$$

para $i = 1, \dots, q-1$.

Lema 5

Sejam P.A., x^0 , Δ , $Q = \{k_1, \dots, k_q\}$, $\{\gamma_i : i \in Q\}$ definidos anteriormente. Então:

(i) Se x^0 satisfaz (III.5.7.2), P.A. é possível e

$z^* = F^{-1}x^0$ é uma solução ótima do P.A.

(ii) P.A. é impossível se e somente se $hF^{-1}x^0 > g^+$ e

$$\sum_{i \in Q} \delta_i (hF^{-1})_i > \Delta, \quad \text{onde}$$

$$\delta_i = \begin{cases} d_i^- - x_i^0 & \text{se } (hF^{-1})_i > 0 \\ d_i^+ - x_i^0 & \text{se } (hF^{-1})_i < 0 \end{cases}$$

para $i \in Q$.

(iii) Se $hF^{-1}x^0 > g^+$ e P.A. é possível, sejam

$$p = \min\{i : 1 \leq i \leq q, \sum_{j=1}^i \delta_{k_j} (hF^{-1})_{k_j} \leq \Delta\}$$

$$\theta = \frac{\Delta - \sum_{j=1}^{p-1} \delta_{k_j} (hF^{-1})_{k_j}}{(hF^{-1})_{k_p}} \quad (\text{III.5.9})$$

Então, uma solução ótima de P.A. é

$$z^* = F^{-1}x^0 + \sum_{i=1}^{p-1} \delta_{k_i} t_{k_i} + \theta t_{k_p} \quad (\text{III.5.10})$$

onde t_i , ($i = 1, \dots, r$) são as colunas de F^{-1} .

Observações

- (1) Se o P.A. é possível, pode-se sempre retirar uma restrição, sem afetar a solução ótima. Na parte (i) do Lema 5, a restrição (III.5.6 2) pode ser retirada do P.A., sem afetar z^* . Analogamente, em (iii) a k_p -ésima restrição pode ser retirada, onde p é dado por (III.5.9), pois (III.5.10) não depende de $d_{k_p}^-$ e $d_{k_p}^+$.

- (2) No caso (iii) do Lema 5, se

$$(y^t F^{-1})_i \neq 0, \quad i = 1, \dots, r,$$

então

$$y^t z^* < y^t F^{-1} x^0 \quad (\text{III.5.11})$$

pois de (III.5.8) e $hF^{-1}x^0 > g^+$ segue que,

$$\delta_i \leq 0 \quad \text{se} \quad (y^t F^{-1})_i > 0$$

$$\delta_i \geq 0 \quad \text{se} \quad (y^t F^{-1})_i < 0$$

$$\theta \leq 0 \quad \text{se} \quad (y^t F^{-1})_i > 0$$

$$\theta \geq 0 \quad \text{se} \quad (y^t F^{-1})_i < 0$$

Pode-se reescrever z^* como

$$z^* = F^{-1} [x^0 + \sum_{i=1}^{p-1} \delta_{k_i} e_{k_i} + \theta e_{k_p}], \quad z^* \neq F^{-1} x^0$$

e tem-se a desigualdade (III.5.11).

SUBPOT: Um Método de Subotimização para Programação Linear Intervalar

O problema a ser resolvido é

$$\max y^t z$$

$$\text{tal que } c^- \leq Bz \leq c^+$$

com $B \in \mathbb{R}_{r}^{m \times r}$. Caso B não seja de posto r , aplica-se os lemas 3 e 4.

Define-se $J(y)$ para todo $y \in \mathbb{R}^n$, como

$$J(y) = \{i : 1 \leq i \leq m \text{ e } (By)_i < c_i^- \text{ ou } (By)_i > c_i^+\}$$

e seja v o índice de iteração.

Para $v = 0$, acha-se um conjunto de n índices $H(0) \subset \{1, \dots, m\}$ tal que $\{b_i : i \in H(0)\}$ é um conjunto linearmente independente das linhas de B . Escolhe-se $s(0) \in \{1, \dots, m\}$, tal que $s(0) \notin H(0)$ e resolve-se a primeira iteração. Para $v \geq 1$, acha-se $z(v)$, uma solução ótima para o problema auxiliar (P.A.v), dado por:

$$\max y^t z \quad (\text{III.5.12})$$

$$\begin{aligned} \text{tal que } c_i^- \leq b_i z \leq c_i^+ \quad & \text{para } i \in H(v-1) \quad (\text{III.5.12.1}) \\ c_{s(v-1)}^- \leq b_{s(v-1)} z \leq c_{s(v-1)}^+ \end{aligned}$$

onde $H(v-1)$ e $s(v-1)$ são definidos no final da iteração $(v-1)$. Há três casos possíveis:

- (a) (P.A.v) é impossível, então P.I. (y, c^-, B, c^+) é impossível.

(b) (P.A.v) é possível e $J(y^{(v)}) \neq \emptyset$; nesse caso $y^{(v)}$ é uma solução ótima do P.I. (y, c^-, B, c^+) .

(c) (P.A.v) é possível e $J(y^{(v)}) \neq \emptyset$. Neste caso, escolha-se $s(v) \in J(y^{(v)})$ (III.5.13.v) e seja,

$$H(v) = H(v-1) \cup \{s(v-1)\} / k_p(v) \quad (\text{III.5.14.v})$$

onde o sinal " / " denota retirada.

Se a restrição adicional for satisfeita por x^0 , isto é, ocorrendo o caso (i) do Lema 5, faz-se $H(v) = H(v-1)$. Da definição de $s(v)$ é óbvio que o caso (i) do Lema 5, no algoritmo SUBOPT, pode ocorrer somente para $v = 1$, devendo ser ignorado para $v > 1$. Se os casos (a) ou (b) acima ocorrem, o problema termina como sendo impossível para o caso (a) ou com $y^{(v)}$ sendo a solução ótima para o caso (b). Para o caso (c), passa-se para a iteração $v+1$. O Lema 5 é utilizado somente para $B^{(v-1)}$ não-singular, onde $B^{(v-1)}$ é a matriz de (P.A.v) formada pelas linhas b_i de B , $i \in H(v-1)$.

Lema 6

Seja o algoritmo SUBOPT aplicado ao P.I. (y, c^-, B, c^+) . Então $B^{(v)}$ é não-singular para $v \geq 0$.

Prova

Tem-se que $B^{(0)}$ é não-singular pela forma como $H(0)$ é escolhido. Supõe-se que $B^{(v-1)}$ é não-singular e como $B^{(v)}$ difere de $B^{(v-1)}$ somente na $k_p(v)$ -ésima linha, que é substituída por $b_{s(v-1)}$, segue que $B^{(v)}$ é não-singular, se e somente se,

$$(b_{s(v-1)}(B^{(v-1)})^{-1})_{k_{p(v)}} \neq 0.$$

Entretanto, a expressão acima ocorre pela maneira com que Q é constituído.

Teorema 1

Se SUBOPT é aplicado ao P.I. (y, c^-, B, c^+) e

$$\theta_i = \begin{cases} 1 & \text{se } \{(b_j F^{-1})_i : j = \min\{k : (b_k F^{-1})_i \neq 0\}\} > 0 \\ 0 & \text{se } \{(b_j F^{-1})_i : j = \min\{k : (b_k F^{-1})_i \neq 0\}\} < 0 \end{cases}$$

para todo i tal que $(y^t F^{-1})_i = 0$

é usado com (III.5.8) quando o Lema 5 é usado para resolver $(P.A.v)$, $v \geq 1$; então o caso (iii) do Lema 5 ocorre somente um número finito de vezes.

Prova

Para $v > 1$, o problema $(P.A.v+1)$ é obtido de $(P.A.v)$ segundo (III.5.13.v) e (III.5.14.v), a $k_{p(v)}$ -ésima restrição que não afeta $z^{(v)}$ é retirada e uma restrição $(s(v)$ -ésima) não satisfeita por $z^{(v)}$ é adicionada.

Assim,

$$y^t z^{(v+1)} \leq y^t z^{(v)} \quad (\text{III.5.15})$$

Através de uma perturbação, equivalente à usada por Charnes [17] para o método dos simplexos, pode-se excluir a igualdade em (III.5.15). A desigualdade estrita em (III.5.15) garante que o problema auxiliar $(P.A)$, no algoritmo SUBOPT não se repete. Como existe um número finito de $(P.A)$ distintos, ga-

rante-se que ocorrerá um número finito de iterações.

Supõe-se que P.I. (y, c^-, B, c^+) foi substituído por P.I. $(y_\epsilon, c^-, B, c^+)$, onde

$$y_\epsilon = y + \sum_{i=1}^m \epsilon^i b_i \quad \text{para } \epsilon > 0 \quad (\text{III.5.16})$$

Para ϵ suficientemente pequeno, as soluções ótimas desse problema são as mesmas do problema original. Tem-se que nenhuma das componentes de $y_\epsilon (B^{(v-1)})^{-1}$ se anula (por III.5.16). Consequentemente, $z^{(v-1)}$ é a única solução ótima de (III.5.12) e (III.5.12.1), quando y é substituído por y_ϵ e

$$y_\epsilon^t z^{(v+1)} < y_\epsilon^t z^{(v)} \quad , \quad v \geq 1.$$

Portanto, SUBOPT é finito quando aplicado ao problema perturbado.

O Método de Robers e Ben-Israel

Seja o problema de aproximação no L_1 :

$$\min \sum_{i=1}^N e_i \quad (\text{III.5.17})$$

tal que $Bx + e = y$

$$e = (e_i) = u_i + v_i$$

onde

$$x = (x_j)$$

são as incógnitas, $i = 1, \dots, N$; $j = 1, \dots, m$. A matriz $B = (b_{ij})$ e o vetor $y = (y_i)$ são dados.

O dual correspondente é

$$\max y^t z$$

$$\text{tal que } B^t z = 0 \quad (\text{III.5.18})$$

$$-e \leq z \leq e$$

Nesse método resolve-se o problema (III.5.17) através do problema (III.5.18) por um algoritmo de programação intervalar que é uma versão simplificada do método de subotimização. Reescrevendo (III.5.18), tem-se

$$\max y^t z$$

$$\text{tal que } \begin{bmatrix} 0 \\ -e \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} B^t \\ I \end{bmatrix} z \leq \begin{bmatrix} 0 \\ e \end{bmatrix}$$

O método em questão, resolve na v -ésima iteração um problema auxiliar (P.A.v) da forma

$$\max y^t z \quad (\text{III.5.19})$$

$$\text{tal que } c^{(v)-} \leq A^{(v)} z \leq c^{(v)+} \quad (\text{III.5.20.v})$$

$$c^{h(v)-} \leq a^{h(v)} z \leq c^{h(v)+} \quad (\text{III.5.21.v})$$

onde $c^{(v)-} = \begin{bmatrix} 0 \\ -e \end{bmatrix}$, $c^{(v)+} = \begin{bmatrix} 0 \\ e \end{bmatrix}$, $A = \begin{bmatrix} B^t \\ I \end{bmatrix}$.

Tem-se que (III.5.20.v) é um conjunto de N restrições de (III.5.18) escolhidas de tal forma que $A^{(v)}$ seja não-singular; (III.5.21.v) é uma única restrição de (III.5.18).

Portanto, (P.A.v) é um subprograma de (III.5.18); $z^{(v-1)}$ é a solução ótima de (III.5.19) e (III.5.20.v) e $z^{(v)}$ é a solução ótima de (III.5.19), (III.5.20.v) e (III.5.21.v).

Para $v = 1$, toma-se

$$A^{(1)} = I, \quad c^{(1)-} = -e, \quad c^{(1)+} = e$$

e (III.5.21.v) como uma das restrições $0 \leq B^t z \leq 0$ de (III.5.18).

Então $z(0) = z_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, N$) é solução de:

$$\max y^t z$$

tal que $-e \leq z \leq e$

$$e \quad z_i^{(0)} = \begin{cases} 1 & \text{se } y_i > 0 \\ \theta_i & \text{se } y_i = 0 \\ -1 & \text{se } y_i < 0 \end{cases} \quad -1 \leq \theta_i \leq 1.$$

Para $v \geq 1$, supõe-se que $z^{(v-1)}$ e $(A^{(v)})^{-1}$ são conhecidos. Se $z^{(v-1)}$ satisfaz (III.5.21.v) então $z^{(v)} = z^{(v-1)}$. Caso contrário $z^{(v)}$ é obtido de $z^{(v-1)}$ da seguinte forma:

(1) Seja

$$\Delta = \begin{cases} a^{h(v)} z^{(v-1)} - c^{h(v)+} & \text{se } \Delta \text{ positivo} \\ a^{h(v)} z^{(v-1)} - c^{h(v)-} & \text{se } \Delta \text{ negativo} \end{cases}$$

a quantidade pela qual (III.5.21.v) é violada para $z^{(v-1)}$.

(2) Seja $Q = \{i : 1 \leq i \leq n, (a^{h(v)} (A^{(v)})^{-1})_i \neq 0, \gamma_i \geq 0\}$ onde

$$\gamma_i = \frac{(y^t (A^{(v)})^{-1})_i}{(a^{h(v)} (A^{(v)})^{-1})_i} \quad \text{ sinal de } \Delta.$$

Q é um conjunto de índices das componentes de $(A^{(v)} y^{(v-1)})$ que podem ser modificadas para que (III.5.21.v) torne-se possível, mantendo (III.5.20.v) possível; γ_i é o custo marginal da mudança em $(A^{(v)} y^{(v-1)})_i$, $i \in Q$.

Ordena-se os índices de Q da forma:

$$Q = \{k_1, k_2, \dots, k_q\} \quad \text{onde } \gamma_{k_1} \leq \gamma_{k_2} \leq \dots \leq \gamma_{k_q} \quad e$$

$$k_i < k_{i+1} \quad \text{se } \gamma_{k_i} = \gamma_{k_{i+1}}$$

(3) $z^{(v)}$ é dado por

$$z^{(v)} = z^{(v-1)} + (A^{(v)})^{-1} \left[\sum_{i=1}^{p-1} \delta_{k_i} e_{k_i} + \theta e_{k_p} \right] \quad (\text{III.5.22})$$

onde: e_k é o k -ésimo vetor unitário, $k \in Q$.

$$\delta_k = \begin{cases} (c^{(v)-} - A^{(v)} z^{(v-1)})_k & \text{se sinal de } \Delta = \text{sinal de} \\ & (a^{h(v)} (A^{(v)})^{-1}) \\ (c^{(v)+} - A^{(v)} z^{(v-1)})_k & \text{se sinal de } \Delta = - \text{sinal de} \\ & (a^{h(v)} (A^{(v)}))^{-1} \end{cases}$$

$$p = \min\{i: 1 \leq i \leq q, \quad \left| \sum_{j=1}^i \delta_{k_j} (a^{h(v)} (A^{(v)}))^{-1}_{k_j} \right| \geq |\Delta|\}$$

$$\theta = \frac{-\Delta - \sum_{j=1}^{p-1} \delta_{k_j} (a^{h(v)} (A^{(v)}))^{-1}_{k_j}}{(a^{h(v)} (A^{(v)}))^{-1}_{k_p}}$$

O δ_k é a maior mudança em $(A^{(v)} z^{(v-1)})$ ao tornar (III.5.21.v) possível sem violar (III.5.20.v). Então $z^{(v)}$ dado por (III.5.22) é obtido de $z^{(v-1)}$ após p mudanças.

Se $z^{(v)}$ satisfizer todas as restrições de (III.5.18), então é uma solução ótima de (III.5.18). Caso contrário forma-se (P.A.v+1) da forma: a k -ésima restrição é retirada e substituída pela restrição (III.5.21.v); toma-se qualquer restrição de (III.5.18) violada por $z^{(v)}$ como restrição adicio

nal (III.5.21.v+1).

O algoritmo termina em um número f , finito, de passos. A solução ótima de (P.A.f) calculada na f -ésima iteração é uma solução ótima de (III.5.18). A matriz $A^{(v+1)}$ obtida da matriz não-singular $A^{(v)}$ substituindo sua k_p -ésima linha por $a^{h(v)}$ é também não-singular.

Tem-se que esse algoritmo é um método dual com uma ou mais mudanças básicas por iterações. A solução $z^{(f)}$ de (III.5.18) é usada para obter uma solução $e^* = (e_i^*)$, $x^* = (x_j^*)$, $i = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, m$ de (III.5.17), do seguinte modo:

- seja $A^{(f+1)}$ a matriz obtida de $A^{(f)}$ trocando a k_p -ésima linha com $a^{h(f)}$. Então

$$x_j^* = \begin{cases} 0 & \text{se a linha } j \text{ de } B^t \text{ não está em } A^{(f+1)}. \\ y^t (A^{(f+1)})_i^{-1} & \text{se a linha de } j \text{ de } B^t \text{ é a } i\text{-ésima} \\ & \text{linha de } A^{(f+1)}. \end{cases}$$

e $e^* = y - Bx^*$, sendo (e^*, x^*) a solução ótima de (III.5.17), pelo teorema da dualidade de programação linear.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Tem-se então, o problema:

$$\max 7/2z_1 + z_2 + 9/2z_3 + 3z_4 + 5z_5 + 2z_6$$

tal que:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 \leq 0 \\ 0 \leq z_1 + 2z_2 + 3z_3 + 4z_4 + 5z_5 + 6z_6 \leq 0 \\ -1 \leq z_1 \leq 1 \\ -1 \leq z_2 \leq 1 \\ -1 \leq z_3 \leq 1 \\ -1 \leq z_4 \leq 1 \\ -1 \leq z_5 \leq 1 \\ -1 \leq z_6 \leq 1 \end{array} \right.$$

O primeiro problema auxiliar é:

$$\max 7/2z_1 + z_2 + 9/2z_3 + 3z_4 + 5z_5 + 2z_6$$

tal que

$$\left\{ \begin{array}{l} -1 \leq z_1 \leq 1 \\ -1 \leq z_2 \leq 1 \\ -1 \leq z_3 \leq 1 \\ -1 \leq z_4 \leq 1 \\ -1 \leq z_5 \leq 1 \\ -1 \leq z_6 \leq 1 \\ 0 \leq z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 \leq 0 \end{array} \right.$$

então, tem-se:

$$z^0 = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$$

$$a^{h(1)} = (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1)$$

$$\Delta = 6$$

$$y^t(A^1)^{-1} = (7/2 \quad 1 \quad 9/2 \quad 3 \quad 5 \quad 2)$$

$$a^{h(1)}(A^1)^{-1} = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1)$$

$$\gamma_i = (7/2, 1, 9/2, 3, 5, 2)$$

$$Q = (2, 6, 4, 1, 3, 5)$$

$$\delta_k = (-2, -2, -2, -2, -2, -2)$$

$$p = 3$$

$$\theta = -2$$

$$z^{(1)} = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1)$$

$$+ I \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$= (1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1)$$

O segundo problema auxiliar $\tilde{e}$:

$$\max 7/2 z_1 + z_2 + 9/2 z_3 + 3z_4 + 5z_5 + 2z_6$$

tal que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -1 \leq z_1 & \leq 1 \\ -1 \leq z_2 & \leq 1 \\ -1 \leq z_3 & \leq 1 \\ 0 \leq z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 & \leq 0 \\ -1 \leq z_5 & \leq 1 \\ -1 \leq z_6 & \leq 1 \\ 0 \leq z_1 + 2z_2 + 3z_3 + 4z_4 + 5z_5 + 6z_6 & \leq 0 \end{array} \right.$$

$$a^{h(2)} = (1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6)$$

$$\Delta = -3$$

$$y^t(A^2)^{-1} = (1/2 \ -2 \ 3/2 \ 3 \ 2 \ -1)$$

$$a^{h(2)}(A^2)^{-1} = (-3 \ -2 \ -1 \ 4 \ 1 \ 2)$$

$$\gamma_i = (1/6, -1, 3/2, -3/4, -2, 1/2)$$

$$Q = (5, 2, 4, 1, 6, 3)$$

$$\delta = (-2, 0, -2, 0, 0, 2)$$

$$p = 4$$

$$\theta = -1$$

$$z^{(2)} = (0 \ -1 \ 1 \ 0 \ 1 \ -1)$$

Portanto, tem-se todas as restrições satisfeitas por $z^{(2)}$ e então:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(A^{(3)})^{-1} = \begin{bmatrix} -1/3 & -2/3 & -1/3 & 4/3 & 1/3 & 2/3 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & -1/3 & -2/3 & -1/3 & -4/3 & -5/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$y^t(A^3)^{-1} = \left(-\frac{1}{6}, -\frac{14}{6}, \frac{8}{6}, \frac{22}{6}, -\frac{11}{6}, -\frac{4}{6}\right)$$

$$\text{e } x^* = \left(\frac{22}{6}, -\frac{1}{6}\right)$$

$$y = \frac{22}{6} - \frac{1}{6}x$$

III.6. Método de Schlossmacher (1973)

Esse método consiste de um procedimento iterativo para resolver o problema de ajuste de curvas por desvios absolutos, que utiliza o método dos mínimos quadrados ponderados.

Ao resolver um problema pelo método dos mínimos quadrados ponderados, minimiza-se $I = \sum_{i=1}^N w_i R_i^2$ (onde R_i são os resíduos e w_i são os pesos); considerando-se a $(k+1)$ -ésima iteração desse processo, tem-se

$$I(k+1) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{|R(k)_i|} R^2(k+1)_i,$$

onde os pesos $\frac{1}{|R(k)_i|}$ são determinados na k -ésima iteração.

Quando $|R(k)_i - R(k+1)_i| \approx 0$, $i = 1, \dots, N$, tem-se:

$$I(k+1) \approx \sum_{i=1}^N |R(k+1)_i|,$$

que dá a aproximação desejada.

Portanto, o procedimento utilizado é o seguinte:

- (1) Resolve-se o problema normal de mínimos quadrados, com pesos $w_i = 1$, $i = 1, \dots, N$.
- (2) Com os coeficientes gerados $b(k)$, calcula-se os resíduos $R(k)_i$, $i = 1, \dots, N$.

(3) Resolve-se o problema de mínimos quadrados com

$$w_i = \frac{1}{|R(k)_i|}.$$

(Se algum $R(k)_i \approx 0$, faz-se $w_i = 0$)

(4) Repete-se (2) e (3) até que

$$|R(k+1)_i - R(k)_i| \approx 0.$$

Durante o procedimento, pode acontecer de um resíduo tornar-se muito pequeno em relação aos outros; a observação correspondente deve ser eliminada, igualando a zero o peso associado a esse resíduo. Se, nas iterações seguintes, o resíduo para essa observação tornar-se significativa, ela é novamente considerada no problema.

Não há provas sobre a convergência absoluta do método. Em todos os exemplos de aplicação o método convergiu.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Para esse conjunto obtivemos o seguinte resultado:

iteração	b	a	soma dos resíduos
1	0,085	2,866	7,257
2	-0,066	3,389	7,066
3	-0,137	3,604	6,587
4	-0,161	3,658	6,515
5	-0,166	3,666	6,500
6	-0,166	3,666	6,500

Portanto, a reta desejada é

$$y = 3,666 - 0,166x.$$

III.7. Método de Barrodale e Roberts (1973)

Esse algoritmo é uma modificação do método dos simplexos, aplicada a um problema de estimação linear no L_1 , visto como um problema de programação linear; é uma versão melhorada do método de Barrodale e Young, pois reduz significativamente o número de iterações, passando por vários vértices do conjunto de soluções possíveis em uma única iteração.

Seja o problema de programação linear (II.1.1); fazendo $\beta = b - c$, com b e c vetores não-negativos, tem-se o seguinte problema:

$$\min \sum_{i=1}^N (u_i + v_i)$$

$$\text{tal que } X(b-c) + Iu - Iv = y$$

$$b, c, u, v \geq 0$$

Tem-se uma base inicial formada por $u_1, \dots, u_N$, caso todos os y_i sejam não-negativos; se algum y_i for negativo, troca-se o sinal da linha correspondente e substitue-se u_i por v_i na base.

Sabe-se que $b_j = -c_j$, $u_i = -v_i$, a soma dos custos marginais de b_j e c_j é zero e de u_i e v_i é -2 ; portanto, o quadro pode ser apresentado de forma condensada contendo somente as seguintes informações:

Base	R	b_1	...	b_m
u_1	y_1	x_{11}	...	x_{m1}
.	.	.		.
.	.	.		.
u_N	y_N	x_{1N}	...	x_{mN}
Custos Marginais	$\sum_{i=1}^N y_i$	$\sum_{i=1}^N x_{1i}$	...	$\sum_{i=1}^N x_{mi}$

O algoritmo é implementado em dois estágios. No estágio 1, a escolha da coluna pivô durante as primeiras m iterações restringe-se aos vetores b_j e c_j . O vetor para entrar na base é escolhido como sendo o de maior custo marginal não-negativo. O vetor para sair da base é escolhido entre os vetores u_i e v_i , como sendo o que causa maior redução na função objetivo. Pode ocorrer que nenhum vetor seja encontrado para sair da base, isto é, a coluna pivotal escolhida, pode conter somente elementos não-positivos; isso ocorre somente se a matriz X tem posto menor que N . Nesse caso ignora-se a coluna pivô b_j (ou c_j) e não realiza-se transformação simplex.

No final do estágio 1, o posto da matriz X ($k \leq N$) é determinado pelo número total de vetores b_j e c_j na base. Desde que k dos vetores u_i (ou v_i) foram retirados da base, o quadro atual representa uma aproximação que interpola no mínimo k pontos dados (como afirma a propriedade 1'). Se a aproximação interpolar mais de k pontos dados, então o quadro é degenerado.

O estágio 2 envolve trocas de vetores u_i e v_i não básicos com u_i e v_i básicos; os vetores básicos b_j e c_j

não podem deixar a base nesse estágio.

O vetor que entra na base é aquele com o maior custo marginal positivo e o vetor que sai da base é o que causa máxima redução na função objetivo. O algoritmo termina quando todos os custos marginais forem não-positivos.

No estágio 2, cada quadro simplex corresponde a uma aproximação que interpola k pontos dados; à cada iteração, $(k-1)$ desses pontos ficam fixos. O vetor que está entrando na base determina qual ponto sairá desse conjunto de interpolação e o vetor que está saindo da base, determina o novo ponto de interpolação.

Se, no quadro final do estágio 2, aparecerem alguns b_j e c_j com valores negativos associados a eles, troca-se tais vetores básicos b_j (ou c_j) com vetores não-básicos correspondentes c_j (ou b_j).

A principal modificação que é feita, comparando com o método dos simplexos, é a escolha do vetor u_i ou v_i para sair da base. Nos dois estágios esse vetor é escolhido como o que causa máxima redução na função objetivo. Geometricamente, a transformação simplex que é feita a seguir, equivale a saltar vários vértices simplex, sendo que isso é devido ao fato de $u_i = -v_i$.

A regra normal para determinar o vetor para sair da base é modificada da seguinte forma: primeiramente, aplica-se a regra normal para determinar a linha pivô entre os vetores básicos u_i e v_i . Localiza-se o pivô e subtrai-se duas vezes o valor deste, do custo marginal da coluna do pivô; se o resultado for não-positivo, faz-se a transformação simplex usando esse pi

vô. Caso contrário, subtrai-se duas vezes a linha pivô da linha de custos marginais, multiplica-se a linha pivô por (-1) e troca-se o vetor u_i (ou v_i) da base, correspondente à linha pivô, por v_i (ou u_i).

Essa operação reduz o valor da função objetivo e troca o sinal do pivô. A regra normal para escolher a linha pivô é aplicada novamente e um novo pivô é escolhido. Esse procedimento é repetido até que um pivô não seja rejeitado e então realiza-se a transformação simplex com este pivô.

As regras de transformação simplex do quadro são as regras normais aplicadas na forma padrão do método dos simplesos.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Para esse conjunto de dados, tem-se o seguinte resultado:

Base	R	b_1	b_2
u_1	7/2	1	1
u_2	1	1	2
u_3	9/2	1	3
u_4	3	1	4
u_5	5	1	5
u_6	2	1	6
Custos Marginais	19	6	21

Base	R	b_1	b_2
u_1	$11/4$	$3/4$	$-1/4$
u_2	$-1/2$	$1/2$	$-1/2$
u_3	$9/4$	$1/4$	$-3/4$
b_2	$3/4$	$1/4$	$1/4$
u_5	$5/4$	$-1/4$	$-5/4$
u_6	$-5/2$	$-1/2$	$-6/4$
Custos Marginais	$13/4$	$3/4$	$-21/4$

Base	R	u_1	u_4
b_1	$11/3$	$4/3$	$-1/3$
u_2	$-7/3$	$-2/3$	$1/6$
u_3	$4/3$	$-1/3$	$1/12$
b_2	$-1/6$	$-1/3$	$1/12$
u_5	$13/6$	$1/3$	$-1/12$
u_6	$-2/3$	$2/3$	$-1/6$
Custos Marginais		-1	-1

Como todos u_i e v_i não-básicos têm custos marginais negativos ou iguais a zero, não é necessário realizar o estágio 2. Portanto, a solução é

$$y = \frac{11}{3} - \frac{1}{6}x.$$

III.8. Método de Nabih N. Abdelmalek (1975)

Esse método é equivalente a um algoritmo dual simplex aplicado a um problema de programação linear com variáveis limitadas não-negativas.

Seja o problema (II.1.1) e seu dual (II.1.2). Considerando-se $b_i = f_i + 1$, tem-se a formulação:

$$\max Z = \sum_{i=1}^N y_i (b_i - 1) \quad (\text{III.8.1})$$

tal que

$$X^t b = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_{i1} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_{im} \end{bmatrix}$$

$$0 \leq b_i \leq 2$$

Esse é um problema de programação linear em variáveis limitadas não-negativas; pode ser resolvido pelo método dos simplexos como um problema com $(m+N)$ restrições. Entretanto, observando-se certas regras, o mesmo problema pode ser resolvido sem adicionar as N restrições. A sua solução é baseada no seguinte resultado cuja prova é encontrada na página 387 de [17]: Uma condição necessária e suficiente para que uma solução não nula de (III.8.1) seja ótima é que $(N-m)$ elementos de b , tenham valor zero (limite inferior) ou valor 2 (limite superior) e que os outros m elementos sejam variáveis básicas.

Para esse algoritmo, constrói-se um quadro simplex para o problema (III.8.1), onde:

- $k_i(X^t)$, $i=1, \dots, N$ é a i -ésima coluna da matriz X^t .
- b_B é a solução básica.
- O conjunto de índices $I(b) \subset \{1, 2, \dots, N\}$ é o conjunto que indica a base com a propriedade de que

os vetores $\{k_i(X^t) / i \in I(b)\}$ formam uma base em E^m .

- $L(b)$ e $U(b)$ são os indicadores para as variáveis b não-básicas que estão respectivamente, no limite inferior e superior, ou seja:

$$L(b) = \{i \in \{1, 2, \dots, N\} / b_i = 0, i \notin I(b)\}$$

$$U(b) = \{i \in \{1, 2, \dots, N\} / b_i = 2, i \notin I(b)\}$$

Para todo $k_i(X^t)$, $i \notin I(b)$ tem-se:

$$w_i = B^{-1}k_i(X^t)$$

$$z_i = y_B^t w_i \quad \text{ou} \quad z_i = y_B^t B^{-1}k_i(X^t)$$

Como algumas variáveis não-básicas estão no limite superior, tem-se:

$$b_B = B^{-1} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_{i1} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_{im} \end{bmatrix}$$

$$- \sum_{i \in U(b)} 2B^{-1}k_i(X^t)$$

Denotando o primeiro termo acima por b_{B_0} , tem-se:

$$b_B = b_{B_0} - 2 \sum_{i \in U(b)} w_i$$

A função objetivo é dada por:

$$\sum_{i \in I(b)} y_i (b_i - 1) + \sum_{i \in L(b)} y_i + \sum_{i \in U(b)} y_i$$

O Algoritmo Dual-Simplex

Primeiramente, escolhe-se m colunas linearmente independentes da matriz X^t para formar uma base B . O quadro simplex é formado calculando os vetores w_i e o conjunto $\{z_i - y_i\}$. No início, as variáveis b_i não-básicas têm valor zero.

- (1) Para $z_i - y_i < 0$, $i \in L(b)$, põe-se $b_i = 2$ e indica-se com uma marca acima da coluna correspondente. Calcula-se b_B .
- (2) Se todos b_{B_ℓ} satisfazem $0 \leq b_{B_\ell} \leq 2$, tem-se uma solução ótima. Caso contrário, passa-se para (3).
- (3) Considera-se o primeiro elemento de b_{B_ℓ} , $\ell=1,2,\dots$, que é menor do que zero ou maior do que 2, denominando-o b_{B_i} . A coluna correspondente na base é substituída por uma coluna não-básica de acordo com (3.1)-(3.4) abaixo. Se o novo b_{B_i} violar $0 \leq b_{B_i} \leq 2$, essa iteração é repetida até que a condição seja satisfeita. Seja $k_j(X^t)$ associada a b_{B_i} e $k_r(X^t)$ a coluna que substituirá $k_j(X^t)$ na base. Tem-se dois casos:

1.º Caso

Se $b_{B_i} < 0$, $k_r(X^t)$ é determinada por

$$\theta_r = \max(\theta_1, \theta_2) < 0, \text{ onde:}$$

$$\theta_1 = (z_r - y_r) / w_{ir} = \max_s \{(z_s - y_s) / w_{is}\},$$

$$w_{is} < 0, \quad s \in L(b)$$

$$\theta_2 = (z_r - y_r) / w_{ir} = \max_s \{(z_s - y_s) / w_{is}\},$$

$$w_{is} > 0, \quad s \in U(b)$$

(3.1) Se $\theta_r = \theta_1$, transforma-se o quadro na forma usual e volta-se a (2).

(3.2) Se $\theta_r = \theta_2$, transforma-se o quadro na forma usual, soma-se 2 ao novo b_{B_i} , retira-se a marca da coluna r indicando que b_r não está mais no seu limite superior. Volta-se a (2).

2.º Caso

Se $b_{B_i} > 0$, $k_r(X^t)$ é determinada por:

$$\tau_r = \min(\tau_1, \tau_2) > 0, \quad \text{onde:}$$

$$\tau_1 = (z_r - y_r) / w_{ir} = \min_s \{(z_s - y_s) / w_{is}\},$$

$$w_{is} > 0, \quad s \in L(b)$$

$$\tau_2 = (z_r - y_r) / w_{ir} = \min_s \{(z_s - y_s) / w_{is}\},$$

$$w_{is} < 0, \quad s \in U(b)$$

(3.3) Se $\tau_r = \tau_1$, transforma-se o quadro na forma usual. Marca-se a coluna $k_j(X^t)$ para indicar que b_j está no limite superior. Subtrai-se $2w_j$

de b_B e volta-se a (2).

(3.4) Se $\tau_r = \tau_2$, transforma-se o quadro na forma usual, remove-se a marca da coluna $k_r(X^t)$ e põe-se uma marca na coluna $k_j(X^t)$. Soma-se 2 ao novo b_{B_i} e subtrai-se $2w_j$ de b_B . Volta-se a (2).

Esse algoritmo foi modificado, de forma a saltar certas iterações intermediárias; essa modificação consiste simplesmente em duas mudanças:

- (a) Aplica-se o processo de Gauss-Jordan após adicionar $2w_r$ ou subtrair $2w_j$.
- (b) A mudança no quadro deve ser feita após somar $2w_r$ ou subtrair $2w_j$ de b_B , isto é, até que as colunas não-básicas entrem e saiam da base, com o correspondente b_{B_i} violando $0 \leq b_i \leq 2$. Esse processo continua até que a última coluna não-básica, para a qual b_{B_i} satisfaz $0 \leq b_i \leq 2$, seja encontrada. Esse processo garante a máxima redução na função objetivo.

As regras abaixo determinam a seqüência das k colunas não-básicas que entram na base e podem deixá-la em uma iteração.

Sejam $\{z_i - y_i\}$ os custos marginais; a seqüência de colunas não básicas para entrar e sair da base é determinada por:

Regra 1

Se $b_{B_i} > 0$, a seqüência é dada pelas colunas correspondentes aos parâmetros $\tau_r = (z_r - y_r) / w_{ir} > 0$, $r \notin I(b)$ começando do menor.

Regra 2

Se $b_{B_i} < 0$, a seqüência é dada pelas colunas correspondentes aos parâmetros $\theta_r = (z_r - y_r) / w_{ir} < 0$, $r \notin I(b)$ começando pelo maior.

O novo algoritmo, modifica somente o passo (3) do anterior, da forma:

(3') Para b_{B_ℓ} , $\ell = 1, \dots, m$, considera-se:

$$b_{B_i} = \min\{b_1, b_2\} \quad \text{onde:}$$

$$b_1 = \min_{\ell} \{b_{B_\ell}, b_{B_\ell} < 0\}$$

$$b_2 = \min_{\ell} \{2 - b_{B_\ell}, b_{B_\ell} > 2\}$$

Calcula-se o novo $\bar{b}'_{B_i}$ por:

$$\bar{b}'_{B_i} = b_{B_i} \quad \text{para o quadro 1}$$

$$\bar{b}'_{B_i} = b'_{B_i} / w_{i,t-1} \quad \text{para os quadros } t = 2, \dots, k$$

onde b'_B é b_B somado a $2w_r$ ou subtraído de $2w_j$.

$$\bar{w}_{it} = w_{it} \quad \text{para } t = 1$$

$$\bar{w}_{it} = w_{it} / w_{i,t-1} \quad \text{para } t = 2, \dots, k.$$

Se o novo $\bar{b}'_{B_i}$ violar $0 \leq b_i \leq 2$, x_r^t deixa a base pelo seguinte procedimento:

1.º Caso

$\bar{b}'_{B_i} < 0$ e x_r^t é determinada pelas regras dadas acima.

(3.1) Se $\bar{w}_{ir} < 0$, passa-se para (3.5).

(3.2) Se $\bar{w}_{ir} > 0$, soma-se $2w_r$ a b'_B e passa-se para (3.5). Retira-se a marca da coluna x_r^t para indicar que b_r não está mais no seu limite superior.

2.º Caso

$\bar{b}'_{B_i} > 0$ e x_r^t é determinada pelas regras dadas acima.

(3.3) Se $\bar{w}_{ir} > 0$, subtrai-se $2w_j$ de b'_B e põe-se uma marca na coluna x_j^t para indicar que ela está no seu limite superior. Passa-se para (3.5).

(3.4) Se $\bar{w}_{ir} < 0$, soma-se $2w_r$ a b'_B e subtrai-se $2w_j$ de b'_B . Retira-se a marca da coluna x_r^t e faz-se uma marca em x_j^t . Passa-se para (3.5).

(3.5) Calcula-se $\bar{b}'_{B_i}$. Se a resposta não satisfizer $0 \leq \bar{b}'_{B_i} \leq 2$, troca-se x_j^t por x_i^t e passa-se para o 1.º Caso ou 2.º Caso, dependendo de $\bar{b}'_{B_i}$. Caso contrário, muda-se o quadro da maneira u-

sual e passa-se para o passo (2) do algoritmo.

Usow (1967), apresentou um método baseado no método de aproximação no L_1 que é equivalente ao método dual-sim_{plex} aplicado a um problema com variáveis limitadas.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de observações:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Para esse conjunto de dados, obtém-se o seguinte resultado:

	y_B	B	b_B	x_1^t	x_2^t	x_3^t	x_4^t	x_5^t	x_6^t
①			6	1	1	1	1	1	1
			21	1	2	3	4	5	6
②	7/2	x_1^t	11	1	0	-1	-2	-3	-4
	1	x_2^t	-13	0	1	2	3	4	5
				0	0	-6	-7	-23/2	-11
③	7/2	x_1^t	1	1	2/3	1/3	0	-1/3	-2/3
	3	x_2^t	1	0	1/3	2/3	1	4/3	5/3

O quadro ① contém os dados iniciais; o quadro ② contém os dados modificados pela escolha de x_1^t e x_2^t para formar a base B e o cálculo dos $z_i - y_i$; contém também as colunas marcadas correspondendo as $z_i - y_i < 0$. Esses são os passos (1) e (2) do algoritmo. Como os elementos do vetor

b_B não satisfazem a restrição $0 \leq b_{B_i} \leq 2$, passa-se para o passo (3') do algoritmo, obtendo:

$$b_{B_2} = -13 < 0 \implies \theta_r = \theta_5 = -2,87$$

$$y_{25} = 4 > 0, \text{ então soma-se } 2\begin{pmatrix} -3 \\ 4 \end{pmatrix} \text{ a } b'_B, \text{ obtendo } \begin{pmatrix} 5 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

Calcula-se $\bar{b}'_{B_i} = -5 < 0$, $\theta_r = \theta_4 = -2,33$, $y_{24} = 3 > 0$, então soma-se $2\begin{pmatrix} -2 \\ 3 \end{pmatrix}$ a b'_B , obtendo $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Então $\bar{b}'_{B_i} = 1$ e muda-se o quadro da forma usual de acordo com (3.5), obtendo-se o quadro ③.

Volta-se para o passo (2) e como todos os elementos do vetor b_B satisfazem a restrição $0 \leq b_{B_i} \leq 2$, tem-se a solução ótima:

$$y = \frac{11}{3} - \frac{1}{6}x.$$

111.9. Método de Bloomfield e Steiger (1980)

Esse método é uma extensão natural do método de Karst (1958), onde ajusta-se uma reta com a restrição de que ela passe por um ponto arbitrário; essa reta deve passar por um outro ponto dado. Em seguida, ajusta-se a reta com a restrição de que ela passe por esse ponto. Isso identifica um novo ponto para substituir o anterior e o algoritmo continua até que a reta ajustada não mude. Nota-se que a soma dos desvios absolutos diminui a cada passo e que não são executados mais do que $N-1$ passos antes do término.

Narula e Wellington (1977), comentaram que a técnica de Karst não serve para problemas de regressão com mais parâmetros. O método de Bloomfield e Steiger é uma extensão do método de Karst que não leva somente a uma boa solução numérica para o problema, mas também indica a relação do problema com programação linear. Nesse método, o hiperplano ótimo é determinado iterativamente, sendo que em cada iteração, o hiperplano ajustado interpola k pontos (onde k é o posto de X); um ponto é identificado para deixar de ser interpolado e um novo ponto é encontrado para substituição (escolhe-se a melhor alternativa, usando o método descendente). Portanto, a busca da solução ótima é restrita aos hiperplanos que interpolam k dos N pontos.

Dessa forma, tem-se uma técnica baseada somente em dois parâmetros: inicialmente, escolhe-se um conjunto de k linhas independentes de X , com θ_0 apropriado. Isso pode ser feito de outra forma, tomando $\theta_0 = 0$, correspondendo a um conjunto de pontos vazio; soma-se variáveis passo a passo, até obter um θ_0 apropriado e um conjunto correspondente de k pontos dados.

A cada iteração, um ponto do conjunto atual é identificado como uma alternativa para retirada; esse ponto é então substituído pela melhor alternativa.

Os processos de substituição e retirada dos pontos para serem interpolados são os seguintes:

(i) *Substituição*

Supõe-se que as linhas de $X = (x_i)$ que correspondem ao conjunto atual de pontos são $x_1^T, \dots, x_k^T$ e que x_k^T foi o ponto escolhido para substituição. Há um conjunto de parâmetros θ que satisfaz as restrições restantes:

$$y_i = x_i \theta, \quad i = 1, \dots, k-1 \quad (\text{III.9.1})$$

que pode ser parametrizado como

$$\theta = \theta_o + t\delta$$

onde θ_o é um membro arbitrário do conjunto e δ satisfaz

$$x_i^T \delta = 0, \quad i = 1, \dots, k-1 \quad (\text{III.9.2})$$

Dentro desse conjunto pode-se encontrar o valor θ_{ti} mo minimizando

$$\sum_{i=1}^N |y_i - x_i^T (\theta_o + t\delta)| \quad (\text{III.9.3})$$

O valor de t que minimiza (III.9.3) é a mediana ponderada de

$$\frac{y_i - x_i^T \theta_o}{x_i^T \delta}, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

com relação aos pesos $|x_i^T \delta|$, $i = 1, \dots, N$.

O próximo conjunto de valores de parâmetros pode ser calculado como $\theta_o + t\delta$. Finalmente, o ponto que substituirá x_k é o ponto correspondente à mediana ponderada.

Para θ_o , usa-se os valores dos parâmetros associados a $x_1, \dots, x_k$, satisfazendo (III.9.1) e a equação adicional com $i = k$. Para δ usa-se a coluna apropriada da matriz inversa de B (que é a base formada das k linhas linearmente independentes); essa escolha satisfaz (III.9.2).

(ii) Retirada

O método para a retirada é heurístico e baseado em gradientes. Tem-se que (III.9.3) é uma função linear convexa

por partes de t . O negativo da derivada à direita de (III.9.3) é dado por

$$\left| \sum_{i:r_i < 0} w_i - \sum_{i:r_i > 0} w_i \right| - \sum_{i:r_i = 0} w_i \quad (\text{III.9.4})$$

onde $r_i = (y_i - x_i^T \theta_0) / x_i^T \delta$ e $w_i = |x_i^T \delta|$.

Se (III.9.4) é negativa, então o único mínimo de (III.9.3) é obtido para $t = 0$ e portanto se x_k for retirado, o mesmo ponto entrará novamente (ou possivelmente um ponto diferente que não melhora o valor da função objetivo nem muda os valores dos parâmetros). Se (III.9.4) é zero, $t = 0$ ainda é um mínimo, mas há um intervalo de valores, todos minimizando (III.9.3). Então o valor da função objetivo não pode ser melhorado, embora existam outros conjuntos de valores dos parâmetros dando o mesmo valor; evita-se, portanto, valores não-positivos de (III.9.4).

Para converter o gradiente em uma estimativa da quantidade pela qual (III.9.3) deve ser reduzida, multiplica-se (III.9.4) pelo inverso da soma dos denominadores de r_i , pois os numeradores são os mesmos para todos os casos possíveis. Tem-se então, a quantidade

$$\rho = \frac{\left| \sum_{r_i < 0} w_i - \sum_{r_i > 0} w_i \right| - \sum_{r_i = 0} w_i}{\sum w_i}$$

para avaliar qual o ponto que deve ser retirado; o escolhido é aquele para o qual ρ é maior.

Nota-se que $\max(\rho, 0)$ tem propriedades de um coeficiente de correlação absoluto entre os resíduos $y_i - x_i^T \theta_0$ e a componente linear $x_i^T \delta$:

- (1) Ele está entre 0 e 1.
- (2) Ele é igual a zero se e somente se a regressão dos resíduos na componente é nula.
- (3) Ele é igual a um se e somente se os sinais dos resíduos e da componente são todos iguais ou todos opostos.

Faz-se o cálculo de ρ para cada candidato à retirada, de acordo com a escolha de θ_0 .

Relação com Programação Linear

De um ponto de vista computacional, são necessários dois conjuntos de valores para a fase da retirada: os resíduos $y_i - x_i^T \theta$ e os pesos $|x_i^T \delta|$, $i = 1, \dots, N$. Há k conjuntos diferentes de pesos, um para cada valor de δ associado ao ponto do conjunto que está sendo testado para ser retirado. Os k valores diferentes de δ são as colunas da inversa da matriz Z , onde

$$Z = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_k^T \end{bmatrix}$$

Os pesos necessários são os produtos das linhas de X , pelas colunas de Z^{-1} (a inversa da submatriz de X), correspondente aos pontos dados que estão fora do conjunto atual. Essas quantidades podem ser facilmente calculadas e depois re-

calculadas, usando a operação de pivotamento de programação linear.

Começando com a matriz $(X : y)$, pelo pivotamento em um elemento de X , deve-se encontrar uma coluna para a qual esse elemento possa tornar-se igual a 1 e depois subtrai-se múltiplos dessa coluna das outras colunas, obtendo portanto os outros elementos dessa linha iguais a zero. Se pivotarmos em um elemento de cada linha da submatriz desejada, sendo um valor em cada coluna, obteremos a matriz onde X foi substituída pelos produtos escalares e y foi substituído pelos resíduos do ajuste correspondente.

A matriz X foi multiplicada por uma matriz que reduziu a submatriz apropriada, à identidade, e que será, portanto, a inversa desejada. O vetor y também teve seus valores subtraídos de múltiplos das colunas de X , e portanto foram substituídos pelos resíduos do ajuste correspondente.

Quando um ponto é substituído por outro, pode-se ajustar a matriz por uma única operação de pivotamento. Se pivotarmos no elemento da nova linha que está na mesma coluna que a unidade na linha que havia sido escolhida anteriormente, as linhas correspondentes aos outros pontos do conjunto atual não são afetadas e portanto, a matriz resultante contém novamente todos os valores necessários para o próximo passo da solução.

Essa operação de pivotamento é a mesma usada para atualizar as bases no método simplex de programação linear. O problema é realizar esse procedimento, usando técnicas de programação linear, pois os problemas necessitam da introdução de variáveis e restrições adicionais e isso torna as matri-

zes bem maiores do que as utilizadas pelo método em questão, não podendo portanto, comparar a eficiência desses métodos.

Aplicação do Método

Seja o seguinte conjunto de dados:

x	1	2	3	4	5	6
y	7/2	1	9/2	3	5	2

Para esse conjunto, observamos o seguinte resultado, considerando-se

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$B^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$x_i^T \theta$	$(x_i^T)^{(1)} \delta$	$(x_i^T)^{(2)} \delta$	$r_i^{(1)}$	$r_i^{(2)}$	$r_{i,ord}$	$x_i^T \delta_{ord}$	$\Sigma (x_i^T)^{(2)} \delta$
7/2	1	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	1	1
-3/2	-1	2	-6	3	11/5	5	6
-4	-2	3	-7/2	7/3	7/3	3	9
-13/2	-3	4	-23/6	23/8	23/8	4	13
-9	-4	5	-11/4	3	3	2	15
	-9	-15				15/2=7,5	

Tem-se,

$$\rho^{(1)} = -1$$

$$\rho^{(2)} = 13/15$$

portanto, $\rho^{(2)}$ é maior e x_2 sai da base, entrando x_4 com $t = 7/3$.

Portanto

$$\theta = \begin{bmatrix} 11/3 \\ -1/6 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \quad B^{-1} = \begin{bmatrix} 4/3 & -1/3 \\ -1/3 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$x_i^T \theta$	$(x_i^T)^{(1)} \delta$	$(x_i^T)^{(4)} \delta$	$r_i^{(1)}$	$r_i^{(4)}$
21/6	1	0	0	0
20/6	2/3	1/3	-7/2	-7
19/6	1/3	2/3	4	2
18/6	0	3/3	0	0
17/6	-1/2	4/3	-13/2	13/8
16/6	-2/3	5/3	1	-2/5

1

5

$$\rho^{(1)} = -1/3$$

$$\rho^{(4)} = -2/15$$

tem-se que $\rho^{(1)}$ e $\rho^{(4)} < 0$ e então, a solução foi en
contrada, como sendo a solução de

$$\begin{cases} a + b = 7/2 \\ a + 4b = 3 \end{cases}$$

que é $y = \frac{11}{3} - \frac{1}{6}x$.

III.10. Conclusões

A descrição dos principais algoritmos até agora des
envolvidos para solucionar o problema de estimação no L_1 ,
foi feita para agrupar esses algoritmos na ordem em que fo-
ram aparecendo, obtendo dessa forma, uma síntese do que foi

feito até agora sobre esse assunto.

O exemplo resolvido no final de cada método serve como ilustração, para auxiliar o entendimento e a familiarização com esses procedimentos.

Através do estudo realizado sobre os métodos apresentados, pode-se observar que para o caso elementar de ajustar uma reta a um conjunto de pontos dados, o método de Karst tem a vantagem de procedimentos e cálculos relativamente fáceis e uma base conceitual bem simples. Entretanto, tem a desvantagem de ser limitado para sistemas de duas dimensões.

O método de Shah e Ramachandran também é de fácil compreensão e utilização; foi sugerido por Karst, baseado numa visão gráfica e geométrica, podendo ser aplicado para problemas com mais de dois parâmetros.

O algoritmo de Barrodale e Young explora a formulação do problema de aproximação no L_1 , através de programação linear; dessa forma, o algoritmo consiste em uma modificação do conhecido método simplex para problemas de programação linear. Devido à estrutura do problema, os quadros podem ser condensados necessitando espaço de armazenamento mínimo.

Outra vantagem vem do fato do conjunto de restrições possuir necessariamente uma base inicial não sendo preciso a incorporação de variáveis artificiais.

Esse foi o primeiro algoritmo eficiente que surgiu para resolver o problema, envolvendo modificações no método simplex.

O método de Robers e Ben-Israel, também usa a formu

lação do problema em termos de programação linear; no entanto, utiliza a formulação dual do problema, resultando em um método que é capaz de resolver um problema de programação linear em variáveis limitadas (ou programação linear intervalar).

O método de Barrodale e Roberts é uma versão melhorada do algoritmo de Barrodale e Young, que reduz significativamente o número de iterações necessárias nesse último, passando por vários vértices do conjunto de soluções possíveis em uma única iteração.

A forma como o quadro pode ser condensado, a disponibilidade de uma solução básica possível inicial e a simplicidade da implementação da idéia de passar por vários vértices em uma única iteração, combinadas, tornam esse método um dos mais eficientes para o problema no L_1 .

O método de Schlossmacher utiliza uma técnica iterativa bem simples, cujo ponto principal é o algoritmo de mínimos quadrados ponderados para o ajuste de curvas; o procedimento de regressão é computacionalmente simples e requer pouco espaço de memória para o armazenamento de informações à cada iteração.

Outra vantagem do método é que ele pode ser implementado utilizando qualquer programa já pronto para o método dos mínimos quadrados ponderados.

Abdelmalek apresentou um algoritmo relacionado com programação linear onde ele empregou uma transformação no dual do problema e através de uma modificação no algoritmo dual-simplex para variáveis limitadas, resolveu o seu problema.

A estrutura especial do problema permite uma modificação no método dual-simplex para realizar um pivotamento a-

través de várias bases como foi feito no algoritmo de Barrodale e Roberts; entretanto, resolver o dual pelo algoritmo dual-simplex é idêntico a resolver o primal pelo algoritmo simplex primal. Portanto, há equivalência entre os métodos no sentido de que os quadros são semelhantes e o esforço computacional é o mesmo. Pela equivalência dos dois métodos pode-se dizer que eles são comparáveis em termos de velocidade e número de iterações.

O algoritmo de Bloomfield e Steiger tem a vantagem de levar a uma solução numérica altamente eficiente.

As novidades desse método em relação aos outros são a existência de um método eficiente para achar as substituições ótimas e um método heurístico para identificar o ponto a ser retirado.

O método utiliza os mesmos procedimentos de pivota-mento utilizados pelo método dos simplexos e como o algoritmo de Barrodale e Roberts, não necessita da introdução de variáveis artificiais e restrições adicionais.

Entretanto, segundo os estudos feitos pelos autores através de simulações, foi notado que o método em questão é mais rápido do que o de Barrodale e Roberts e que essa vantagem aumenta indefinidamente com o tamanho do problema.

CAPÍTULO IV

APLICAÇÕES

A resistência dos estimadores no L_1 a dados aberrantes e sua robustez à distribuições de caudas alongadas, fazem desses estimadores alternativas úteis para os usuais estimadores de mínimos quadrados.

O recente desenvolvimento de algoritmos eficientes para estimação no L_1 em modelos lineares, tem permitido seu uso na análise prática dos dados. Para dados experimentais nos quais não há garantia da não-existência de pontos aberrantes, a aproximação no L_1 é usada por duas razões: ela dá estimativas que são superiores às obtidas pelo método dos mínimos quadrados; em segundo lugar, como uma consequência da observação anterior, ela isola os pontos aberrantes, ou seja, se esses pontos forem corrigidos, o resultado obtido difere muito pouco da aproximação original obtida.

A teoria de que, na presença de dados aberrantes, a aproximação no L_1 é melhor do que a aproximação no L_2 é uma velha idéia, mas que recentemente está sendo confirmada com as evidências numéricas que vêm sendo obtidas na prática. A maior objeção a esse método é que muito pouco se sabe sobre a distribuição dos estimadores obtidos; até que sejam resolvidas todas as dificuldades matemáticas a respeito desse problema, a única alternativa é se apoiar em estudos de simulações.

Seguem algumas aplicações resolvidas com o auxílio do "Statistical Analysis System (SAS)". As regressões no L_1 fo

ram resolvidas usando o método de Barrodale e Roberts.

IV.1. Foram feitas algumas aplicações com o propósito de mostrar as vantagens e as desvantagens do uso do método de regressão no L_1 ; foram resolvidos alguns exemplos pelo método dos mínimos quadrados e pelo método de regressão no L_1 e a seguir, uma análise dos resultados obtidos.

Inicialmente, tem-se uma série de exemplos mostrando que os estimadores no L_1 são resistentes à presença de dados aberrantes; também são mostrados exemplos patológicos, onde os dados possuem claramente uma tendência e o estimador no L_1 tem a desvantagem de não indicar essa tendência, o mesmo não acontecendo com o estimador de mínimos quadrados.

No primeiro conjunto de dados, mostrado na figura (IV.1.1), tem-se a presença de um dado aberrante; o resultado obtido mostra que a reta dos mínimos quadrados sofreu maior influência desse ponto, do que a reta obtida pelo método de regressão no L_1 .

FIGURA (IV, 1.1)

O segundo conjunto de dados, mostrado na figura (IV.1.2), apresenta dois dados aberrantes consecutivos, sendo os demais pontos iguais aos do conjunto anterior. Nesse caso, a reta de mínimos quadrados sofreu maior influência e a reta obtida pelo método de regressão no L_1 , permaneceu inalterada.

———— $y = -0.48888889x + 5 (L_1)$

----- $y = -0.326061x + 4.907273$ (mínimos quadrados)

FIGURA (IV, 1.2)

O terceiro conjunto de dados mostrado na figura (IV.1.3), apresenta dois dados aberrantes, sendo um deles do lado superior das retas e o outro do lado inferior; nesse caso, a reta dos mínimos quadrados é mais próxima da solução obtida pelo método de regressão no L_1 , pois ela foi influenciada por um ponto acima e por um ponto abaixo dela.

FIGURA (IV, 1.3)

No quarto conjunto de dados, mostrado na figura (IV.1.4), tem-se a presença de dois dados aberrantes sendo que um está abaixo das retas e bem no início do conjunto de dados e o outro acima delas e mais no final desse conjunto, ocasionando uma mudança da reta dos mínimos quadrados para baixo na direção do primeiro dado aberrante, e uma tendência para cima por influência do segundo dado aberrante. Nesse caso, a reta de regressão no L_1 permaneceu a mesma.

FIGURA (IV. 1.4)

O quinto conjunto de dados, mostrado na figura (IV.1.5) apresenta os dados dispostos em uma direção (descendente); essa disposição dos dados é mostrada claramente pela reta dos mínimos quadrados, sendo que a reta de regressão no L_1 tem a desvantagem de não indicar essa tendência.

FÍGURA (IV, 1.5)

No sexto conjunto de dados, mostrado na figura (IV.1.6), a situação é análoga, sendo que os dados estão dispostos em outra direção (ascendente) e o resultado obtido pelo método dos mínimos quadrados acompanha essa direção, o mesmo não acontecendo com a reta de regressão no L_1 .

FIGURA (IV.1.6)

Portanto, observa-se que para um conjunto de dados experimentais em que há possibilidade da existência de dados aberrantes, o critério de aproximação no L_1 é adequado, por ser um critério que isola os dados aberrantes, permitindo analisá-los em separado.

Caso estes sejam retirados do conjunto de dados, a

nova aproximação no L_1 produzirá um estimador com pouca diferença do obtido para os dados originais.

IV.2. O princípio dos mínimos quadrados é normalmente defendido com base na suposição de que os erros são normalmente distribuídos. É sem dúvida verdade, que a norma no L_2 é eficiente em tal situação. Entretanto, quando a distribuição dos erros não é normal, costuma-se usar outros critérios para obter estimadores mais precisos.

Para verificar o que acontece quando as distribuições dos erros têm caudas mais alongadas, foi feito um segundo programa onde são geradas cem amostras de erros provenientes das distribuições Normal, Dupla Exponencial e Normal Contaminada.

A distribuição Normal foi gerada através do "SAS"; a Dupla Exponencial foi obtida pelo método da transformação inversa e a Normal Contaminada foi obtida através da distribuição Normal fazendo $f(x) = 0,8N(0,1) + 0,2N(0,3)$.

A partir dos erros gerados através dessas distribuições determinou-se valores de y através do modelo $y = a + bx + \epsilon$, com valores fixos para a e b ($a = 5,0$ e $b = 7,0$) e x variando de 1 a 50. Deste modo, foram calculadas as estimativas de a e b pelos métodos de regressão no L_1 e dos mínimos quadrados. Os resultados são apresentados na tabela a seguir:

MÉTODOS	DISTRIBUIÇÃO					
	NORMAL		NORMAL CONTAMINADA		DUPLA EXPONENCIAL	
	a	b	a	b	a	b
Método dos Mínimos Quadrados						
MÉDIA	5,02803	6,99935	5,07024	6,99779	5,04602	6,99923
E.M.Q.	0,286749	0,0108528	0,41595	0,0156101	0,402912	0,0140474
Método de Regressão no L_1						
MÉDIA	5,05827	6,99804	5,01412	6,99949	5,04851	6,99929
E.M.Q.	0,402363	0,0137497	0,373807	0,012468	0,373645	0,0128772

Através dos resultados obtidos, nota-se que quando os erros têm distribuição normal, os estimadores obtidos pelo método dos mínimos quadrados são mais precisos do que os obtidos pelo método de regressão no L_1 ; tem-se também, que para distribuições de caudas alongadas como o caso da normal contaminada e da dupla exponencial, os estimadores obtidos pelo método de regressão no L_1 têm erros quadráticos médios menores do que os estimadores de mínimos quadrados.

IV.3. Para ilustrar os resultados até agora obtidos, foi resolvido um exemplo clássico cuja discussão é apresentada em [10] e [11].

O problema consiste de uma série de vinte e um dias sucessivos de funcionamento de um processo de oxidação da amônia em ácido nítrico. A variável x_1 representa o fluxo de ar que entra no processo. O óxido nítrico produzido é absorvido em uma torre de absorção; a variável x_2 é a temperatura de resfriamento da água que circula através de espirais nessa torre de absorção e a variável x_3 é a concentração de ácido nítrico circulando no líquido absorvente (obtida do valor real menos 50, vezes 10). A variável dependente y é dez vezes a porcentagem de amônia que entra no processo e é perdida (como ácido nítrico não absorvido); é uma medida (inversa) da eficiência total do processo.

Os dados são apresentados na tabela seguinte:

Número de Observação	Fluxo de Ar x_1	Temperatura de Resfriamento x_2	Concentração de Ácido x_3	Quantidade Perdida y
1	80	27	89	42
2	80	27	88	37
3	75	25	90	37
4	62	24	87	28
5	62	22	87	18
6	62	23	87	18
7	62	24	93	19
8	62	24	93	20
9	58	13	87	15
10	58	18	80	14
11	58	18	89	14
12	58	17	88	13
13	58	18	82	11
14	58	19	93	12
15	50	18	89	8
16	50	18	86	7
17	50	19	72	8
18	50	19	79	8
19	50	20	80	9
20	56	20	82	15
21	70	20	91	15

Deseja-se saber a relação existente entre a variável dependente y e as variáveis independentes x_1, x_2, x_3 ; foi construído o modelo

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$$

e determinou-se a regressão pelo método dos mínimos quadrados e

pelo método de regressão no L_1 , obtendo-se os seguintes resultados:

	Mínimos Quadrados	Regressão no L_1
β_0	-39,91967442	-39,68985507
β_1	0,71564020	0,83188406
β_2	1,29528612	0,57391304
β_3	-0,15212252	-0,06086957
	R-Quadrado (R^2)	
	0,913577	

Nota-se uma pequena diferença entre os valores de β_0 , sendo que para os valores de β_2 e β_3 a diferença é mais acentuada e o valor de β_1 apresenta pequena alteração entre os dois métodos.

Fazendo uma parte da análise dos resíduos (gráfico do resíduo $\times$ valor estimado) para o método dos mínimos quadrados, nota-se a presença de um dado aberrante (a observação número 21) e outras quatro observações (número 1, número 2, número 3, número 4) que estão bem separadas dos outros dados, sendo que a observação número 2 está um pouco isolada, mas encontra-se na faixa horizontal formada pelas 16 observações restantes.

Os resíduos correspondentes à essa análise (exceto os correspondentes às observações números 1, 3, 4, 21) estão situados numa faixa que tem -3 como limite inferior e não chega a 3 no limite superior, sendo que os resíduos estão bem distribuídos nessa faixa e para um deles o resíduo é zero, como mostra a figura (IV.3.1).

Fazendo o mesmo gráfico da análise dos resíduos com os resultados obtidos pelo método de regressão no L_1 , nota-se a presença dos mesmos dados separados dos restantes, obtidos na análise anterior.

Os resíduos correspondentes à essa análise (exceto os correspondentes às observações números 1, 3, 4, 21) estão situados em uma faixa que não chega a -3 no limite inferior e não atinge o valor 2 no limite superior, sendo que nove desses resíduos estão bem próximos de zero, sendo seis deles iguais a zero, como mostra a figura (IV.3.2).

Isso mostra que para essa análise os resíduos estão bem mais próximos de zero e portanto, o ajuste obtido é mais adequado que o obtido pelo método dos mínimos quadrados.

Foi feita uma nova análise do problema pelos dois métodos, retirando a observação de número 21, para verificar qual a influência desse dado aberrante nos dois resultados.

Foram obtidos os seguintes resultados:

	Mínimos Quadrados	Regressão no L_1
β_0	-43,70403096	-39,98644986
β_1	0,88910818	0,83468835
β_2	0,81661987	0,56368564
β_3	-0,10714137	-0,05691057
R-Quadrado (R^2)		
0,948795		

Tem-se uma mudança acentuada nos valores obtidos pelo método dos mínimos quadrados, em relação ao resultado anterior; o mesmo não acontece com os resultados obtidos pelo método de

regressão no L_1 , onde a alteração é quase imperceptível. A presença do dado aberrante (número 21) afetou mais os valores dos parâmetros obtidos pelo método dos mínimos quadrados.

Fazendo a análise dos resíduos para o método dos mínimos quadrados, nota-se ainda a presença das três observações separadas das restantes.

Os resíduos correspondentes à essa análise (exceto os correspondentes às observações números 1, 3, 4), estão situados em uma faixa que não atinge -3 como limite inferior e tem o valor 2 como limite superior. Os resíduos estão bem distribuídos nessa faixa sendo que somente um deles atinge o valor zero, como mostra a figura (IV.3.3).

Fazendo a análise dos resíduos pelo método de regressão no L_1 , nota-se a presença dos mesmos dados (números 1, 3, 4) separados dos demais.

Os resíduos correspondentes às observações (exceto as de números 1, 3, 4) estão situados em uma faixa que tem um ponto correspondente ao valor -3 e outro que não chega a 2. Os restantes estão em uma faixa que não atinge -2 no limite inferior e não chega a 0,5 no limite superior, sendo que nove deles estão bem próximos de zero, sendo que seis têm resíduos iguais a zero. A situação não mudou muito em relação à análise feita com a observação número 21, como mostra a figura (IV.3.4).

Nota-se, portanto, que a retirada da observação número 21 ocasionou uma grande modificação no resultado obtido pelo método dos mínimos quadrados, o mesmo não acontecendo com o resultado obtido pelo método de regressão no L_1 , que mostrou-se menos sensível à presença desse dado aberrante.

Foi feita uma outra análise do problema, desta vez sem as observações de números 21, 1, 3, 4, para verificar a influência desses pontos, que estavam bem separados dos outros, nos resultados obtidos pelos dois métodos; os resultados foram:

	Mínimos Quadrados	Regressão no L_1
β_0	-37,65245890	-35,94140625
β_1	0,79768556	0,82226562
β_2	0,57734046	0,43750000
β_3	-0,06706018	-0,07031250
R-Quadrado (R^2)		
0,975066		

Nota-se uma pequena diferença entre os valores de β_0 nos dois casos.

Comparando esses resultados com os obtidos anteriormente, observa-se que os resultados obtidos pelo método dos mínimos quadrados sofreram maiores alterações do que os obtidos pelo método de regressão no L_1 ; em relação aos resultados obtidos para a primeira análise feita, os resultados obtidos pelo método dos mínimos quadrados também sofreram uma maior alteração, mostrando que esse método é mais sensível à presença de dados aberrantes.

Fazendo a análise dos resíduos para o método dos mínimos quadrados, tem-se que quinze resíduos estão situados em uma faixa que não chega a -1,5 no limite inferior e o limite superior não atinge 1,5. Um resíduo tem valor aproximadamente igual a -2,5 e o outro aproximadamente 2, como mostra a fi-

gura (IV.3.5).

Fazendo a análise dos resíduos para o método de regressão no L_1 , tem-se quinze resíduos situados em uma faixa que vai de -1,5 a 1,5, sendo que quatro deles têm valor zero. Um resíduo tem valor aproximadamente igual a 2 e outro o valor aproximadamente -3, como mostra a figura (IV.3.6).

Nota-se que os dois gráficos dos resíduos são bem semelhantes para os dois métodos utilizados, para esse caso onde foram retirados todos os dados aberrantes.

FIG. (IV.3.1)

FIG. (IV.3.2)

FIG. (IV, 3.4)

FIG. (IV, 3.5)

FIG. (IV.3.6)

BIBLIOGRAFIA

- [1] - Abdelmalek, N.N., An Efficient Method for the Discrete Linear L_1 Approximation Problem. Math. Comp., 29 (131) : 844-850. 1975.
- [2] - Abdelmalek, N.N., On the Discrete Linear L_1 Approximation and L_1 Solutions of Overdetermined Linear Equations. J. of Approximation Theory, 11 : 38-53. 1974.
- [3] - Appa, G. and Smith, C., On L_1 and Chebyshev Estimation. Math. Programming, 5 : 73-87. 1973.
- [4] - Barrodale, I., L_1 Approximation and the Analysis of Data. Appl. Stat., 17 (51). 1968.
- [5] - Barrodale, I. and Roberts, F.D.K., An Improved Algorithm for Discrete L_1 Linear Approximation. Siam J. Numer. Anal., 10 (5) : 839-848. 1973.
- [6] - Barrodale, I. and Roberts, F.D.K., Algorithm 478 : Solution of an Overdetermined System of Equations in the L_1 Norm. C.A.C.M., 17 : 319-320. 1974.
- [7] - Barrodale, I. and Young, A., Algorithms for Best L_1 and L_∞ Linear Approximations on a Discrete Set. Numer. Math., 8 : 295-306. 1966.
- [8] - Bartels, R.H., Conn, A.R. and Sinclair, J.W., Minimization Techniques for Piecewise Differentiable Functions: The L_1 Solution to an Overdetermined Linear System. SIAM J. Numer. Anal., 15 : 224-241. 1978.
- [9] - Bloomfield, Peter and Steiger, William, Least Absolute Deviations Curve-Fitting. Siam J. Soc. Stat. Comput. 1 (2) : 290-301. 1980.
- [10] - Brownlee, K.A., Statistical Theory and Methodology In Science and Engineering. New York, London, Sidney : Wiley, 1965.
- [11] - Daniel, Cuthbert and Wood, Fred S., Fitting Equations to Data. Wiley-Interscience, 1971.

- [12] - Draper, N. and Smith, H., Applied Regression Analysis.
New York : Wiley, 1966.
- [13] - Gentle, J.E., Least Absolute Values Estimation: An
Introduction. Commun. Statist., B6 (5) : 313-328.
1977.
- [14] - Gentle, J.E. and Kennedy, W.J., On Some Properties
of L_1 Estimators. Math. Programming, 12 : 139-140.
1977.
- [15] - Gentle, J.E.; Kennedy, W.J. and Sposito, V.A., On
Least Absolute Values Estimation. Commun. Statist.,
A6 (9) : 839-845. 1977.
- [16] - Gentle, J.E., Kennedy, W.J. and Sposito, V.A., Properties
of the L_1 -Estimate Space. Proc. Statist. Comp.
Section. 1976
- [17] - Hadley, G., Linear Programming. Addison-Wesley,
Reading, M.A., 1962.
- [18] - Karst, Otto J., Linear Curve Fitting Using Least
Deviations. JASA, 53 : 118-132. 1958.
- [19] - Rice, John R. and White, John S., Norms for Smoothing
and Estimation. Siam Review, 6 (3) : 243-256. 1964.
- [20] - Robers, P.D. and Ben-Israel, A., A Suboptimization
Method for Interval Linear Programming: A New Method
for Linear Programming. Systems Research Memo. (206),
The Technological Institute, Northwestern University.
1968.
- [21] - Robers, P.D. and Ben-Israel, A., An Interval
Programming Algorithm for Discrete Linear L_1
Approximation Problems. J. of Approximation
Theory, 2 : 232-336. 1969.
- [22] - Scholossmacher, E.J., An Iterative Technique for
Absolute Deviations Curve Fitting. J. of American
Statistical Association, 68 (344) : 857-859. 1973.

- [23] - Shah, S.M. and Ramachandran, K.V., Curve Fitting
Using Least Absolute Deviations. Bulletin, Calcuta
Stat. Assoc. (10) : 48-53. 1960.
- [24] - Sposito, V.A., Linear and Nonlinear Programming.
Anes, Iowa : The Iowa State University Press, 1975.
- [25] - Sposito, V.A.; Kennedy, W.J. and Gentle, J.E., Useful
Generalized Properties of L_1 Estimators. Commun.
Statist., A9 (21) : 1309-1315. 1980.
- [26] - Sposito, V.A. and Smith, W.C., On a Sufficient
Condition and a Necessary Condition for L_1
Estimation. Appl. Statist. 25 (2) : 154-157. 1976.
- [27] - Sposito, V.A.; Smith, W.C. and McCormick, G.,
Minimizing the Sum of Absolute Deviations.
Göttingen : Vandenhoeck und Ruprecht, 1978.