Capítulo 3 - Mínimos Quadrados Lineares

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

2º Ano - Eng. Civil, Electrotécnica e Mecânica

INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA
Escola Superior de Tecnologia e de Gestão

Outline

Ajuste de Dados

- Dados m pontos (t_i, y_i) pretende-se encontrar um vector x de dimensão n cujos parâmetros ajustam melhor a função modelo $f(t, x)$,

$$\min_x \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - f\left(t_i, x\right)\right)^2$$

- Problema linear se a função f for linear nas componentes de x

$$f\left(t, x\right) = x_1\phi_1 + x_2\phi_2 + \ldots + x_n\phi_n$$

  em que ϕ_j depende apenas de t

- Problema pode ser escrito na forma matricial como $Ax \cong b$, com $a_{ij} = \phi_j(t_i)$ e $b_i = y_i$

Ajuste de Dados

- Problema pode ser escrito na forma matricial como

$$\begin{bmatrix} \phi_1(t_1) & \phi_2(t_1) & \cdots & \phi_n(t_1) \\ \phi_1(t_2) & \phi_2(t_2) & \cdots & \phi_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(t_m) & \phi_2(t_m) & \cdots & \phi_n(t_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

- Fazendo $a_{ij} = \phi_j(t_i)$ e $b_i = y_i$ podemos escrever

$$Ax = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} = b$$

- Como nestes problemas $m > n$, o sistema resultante é sobredeterminado (mais equações do que incógnitas)

Ajuste de Dados

- Sistema é mais correctamente representado por $Ax \cong b$ porque a igualdade não é geralmente satisfeita
- Solução x é o vector que minimiza o quadrado dos desvios anteriormente apresentado que, na notação matricial, coincide com o quadrado da norma-2 do vector resíduo $b - Ax$

$$\min_x \|r\|_2^2 = \min_x \|b - Ax\|_2^2$$

Exemplo 1: Ajuste de Dados

- Encontrar o polinómio do segundo grau $P(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2$ que melhor ajusta os seguintes dados no sentido dos mínimos quadrados

t	-1.0	-0.5	0.0	0.5	1.0
y	1.0	0.5	0.0	0.5	2.0

- Ajustando um polinómio de segundo grau aos cinco pontos origina o problema de mínimos quadrados lineares

$$Ax = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ 1 & t_3 & t_3^2 \\ 1 & t_4 & t_4^2 \\ 1 & t_5 & t_5^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = b$$

- Matrizes cujas colunas (ou linhas) são potencias sucessivas da variável independente é chamada matriz de Vandermonde

Exemplo 1, continuação

- Introduzindo os respectivos valores

$$Ax = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix} = b$$

- Solução deste sistema, que aprenderemos mais tarde a calcular, é

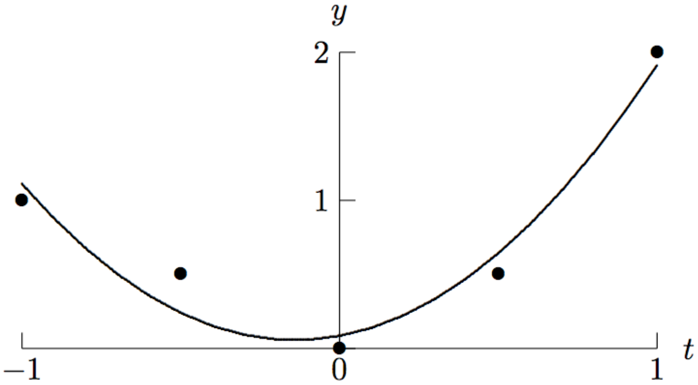
$$x = [0.086 \;\; 0.40 \;\; 1.429]^T$$

pelo que o polinómio é

$$P(t) = 0.086 + 0.40t + 1.429t^2$$

Exemplo 1, continuação

- Curva resultante e pontos dados são mostrados no gráfico



Existência e Unicidade

- Problema de mínimos quadrados linear $Ax \cong b$ tem sempre solução
- Solução é única se, e só se, as colunas de A são linearmente independentes,i.e., se $r(A) = n$ (característica de A é n), sendo A uma matriz $m \times n$
- Se $r(A) < n$ o problema de mínimos quadrados linear não é única
- Vamos considerar apenas o caso em que A tem todas as suas colunas linearmente independentes $r(A) = n$

Ortogonalidade

- Vectores v_1 e v_2 são orthogonais se o seu produto interno (escalar) é nulo, $v_1^T v_2 = 0$
- Espaço gerado pelas colunas da matriz A, span(A)=$\{Ax : x \in \mathbb{R}^n\}$, tem dimensão não superior a n
- Se $m > n$, geralmente $b \notin$span(A), pelo que não existe solução exacta de $Ax = b$
- Vector $y = Ax$ em span(A) mais próximo de b em norma-2 ocorre quando o resíduo $r = b - Ax$ é orthogonal ao span(A),

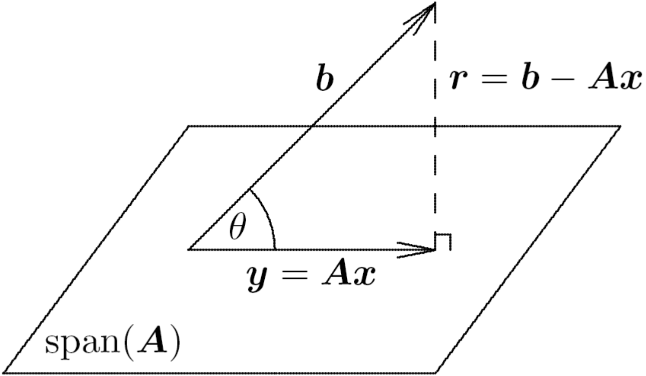
$$A^T r = A^T(b - Ax) = 0,$$

originado a equação normal

$$A^T Ax = A^T b$$

Ortogonalidade, continuação

- Relação geométrica entre *b*, *r* e span(*A*):



Condicionamento

- Matriz não quadrada A, $m \times n$, não admite inversa no sentido usual
- Se $r(A) = n$, a pseudoinversa de A é definida por

$$A^{+} = (A^{T}A)^{-1}A^{T}$$

  e o número de condição por

$$cond(A) = \|A\|_2 \cdot \left\|A^{+}\right\|_2$$

- Por convenção, $cond(A) = \infty$ se $r(A) < n$
- Tal como o numero de condição de matrizes quadradas mede a proximidade da singularidade, o numero de condição de uma matriz rectangular mede a proximidade de ter um característica incompleta ($r(A) < n$)
- Solução do problema de mínimos quadrados linear $Ax \cong b$ é dada por $x = A^{+}b$ que é a solução da equação normal $A^{T}Ax = A^{T}b$

Sensibilidade e Condicionamento

- Sensibilidade da solução do problema de mínimos quadrados $Ax \cong b$ depende de b assim como de A
- Definindo o ângulo θ entre b e $y = Ax$ por

$$\cos(\theta) = \frac{\|y\|_2}{\|b\|_2} = \frac{\|Ax\|_2}{\|b\|_2}$$

- Limite da perturbação Δx na solução x devido à perturbação Δb em b é dada por

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq cond(A)\frac{1}{\cos(\theta)}\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$$

- Da mesma forma para uma perturbação E na matriz A,

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \left([cond(A)]^2\tan(\theta) + cond(A)\right)\frac{\|E\|_2}{\|A\|_2}$$

Método da Equação Normal

- Se A, $m \times n$, tem característica n, a matriz $A^T A$, de dimensão $n \times n$, é simétrica e positiva definida, pelo que a sua factorização de Cholesky

$$A^T A = LL^T$$

pode ser usada para obter a solução x da equação normal

$$A^T Ax = A^T b$$

que tem a mesma solução que o problema de mínimos quadrados linear $Ax \cong b$

- Método da equação normal envolve a transformação

$$\text{rectangular} \longrightarrow \text{quadrada} \longrightarrow \text{triangular}$$

Exemplo 2: Método da Equação Normal

- Utilize o método da equação normal para o ajuste polinomial do exemplo anterior
- Vimos que o problema de mínimos quadrados linear consiste em determinar o vector x que minimiza o resíduo do sistema sobredeterminado

$$Ax = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix} = b$$

- Solução x obtida através da resolução da equação normal $A^T Ax = A^T b$

Exemplo 2, continuação

- Matriz dos coeficientes e termo independente

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1.0 & -0.5 & 0.0 & 0.5 & 1.0 \\ 1.0 & 0.25 & 0.0 & 0.25 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 2.5 \\ 0.0 & 2.5 & 0.0 \\ 2.5 & 0.0 & 2.125 \end{bmatrix},$$

$$A^T b = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1.0 & -0.5 & 0.0 & 0.5 & 1.0 \\ 1.0 & 0.25 & 0.0 & 0.25 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.0 \\ 1.0 \\ 3.25 \end{bmatrix}$$

Exemplo 2, continuação

- Factorização de Cholesky da matriz simétrica e positiva definida $A^T A$ resulta em

$$A^T A = \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 2.5 \\ 0.0 & 2.5 & 0.0 \\ 2.5 & 0.0 & 2.125 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 2.236 & 0 & 0 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 1.118 & 0 & 0.935 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.236 & 0 & 1.118 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 0 & 0 & 0.935 \end{bmatrix} = LL^T$$

- Resolvendo o sistema triangular inferior $Lz = A^T b$ por substituição regressiva obtemos $z = [1.789 \;\; 0.632 \;\; 1.336]^T$
- Resolvendo o sistema triangular superior $L^T x = z$ por substituição progressiva obtemos $x = [0.086 \;\; 0.400 \;\; 1.429]^T$

Considerações Finais

Métodos Disponíveis na NMLibforOctave:

- Método da Equação Normal: `[x, r] = normaleq(A,b)`

Bibliografia:

- Exposição baseada essencialmente no capítulo 3 de
  - Michael T. Heath. "Scientific Computing an Introductory Survey". McGraw-Hill, 2002, New York.