

Quadrados Mínimos Não-Lineares

Egmara Antunes dos Santos

5 de Outubro de 2015

Resumo

Minimizar funções é um problema estudado constantemente em Otimização. Neste trabalho, abordaremos o Problema de Quadrados Mínimos Não-Lineares, o qual possui varias aplicações no campo de Otimização. Problemas desse tipo aparecem com frequência quando se quer, por exemplo, ajustar um conjunto de dados a uma curva e muitas vezes não conseguimos uma solução exata para tal problema. Buscamos uma curva que melhor se ajuste aos dados e que o erro de aproximação seja o menor possível. Uma solução desse tipo é dado pela solução do Problema de Quadrados Mínimos. Veremos isso com mais detalhes neste trabalho. Os métodos utilizados serão o método de Gauss-Newton sem restrições e o método de região de confiança Dogleg para minimizar o modelo usado no método de Gauss-Newton.

Introdução

Na primeira parte deste trabalho, vamos apresentar o Problema de Quadrados Mínimos de uma forma geral. A função objetivo do problema será da forma

$$f(x) = \frac{1}{2} \|R(x)\|^2,$$

onde $R : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. O problema de otimização a ser tratado será

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

Quando o problema é não linear, ou seja, $R(x)$ é não linear, utilizaremos duas estratégias de resolução. A primeira consiste em utilizar o método de Gauss-Newton, que a cada iteração aproxima o problema original por uma problema de Quadrados Mínimos Lineares a ser resolvido. Em resumo, o método de Gauss-Newton irá, a cada iteração k , aproximar a função $f(x)$ pelo modelo quadrático

$$m_k(x - x_k) = \frac{1}{2} \|R_k + J_k(x - x_k)\|^2,$$

e minimizar m_k , sendo $R_k = R(x_k)$ e J_k a matriz Jacobiana de $R(x)$ aplicada em x_k . Note que $R_k + J_k(x - x_k)$ é linear.

Porém em muitos casos, o modelo m_k não é uma aproximação boa para áreas muito distantes de ponto x_k , ocasionando uma aproximação ruim para a função $f(x)$. Iremos então, minimizar o modelo quadrático de Gauss-Newton em uma região próxima do ponto x_k . Ou seja, a segunda estratégia para resolver o Problema de Quadrados Mínimos Não-Lineares, que será estudado na segunda parte deste trabalho, é aproximar $f(x)$ pelo modelo m_k e resolver o problema de minimizar

$$m_k(x - x_k) = \frac{1}{2} \|R_k\|^2 + (x - x_k)^T J_k R_k + \frac{1}{2} (x - x_k)^T J_k^T J_k (x - x_k),$$

sujeito a restrição $\|x - x_k\| \leq \Delta_k$.

A região $\|x - x_k\| \leq \Delta_k$ é chamada região de confiança e Δ_k o raio de confiança. Esperamos que nessa região, o modelo aproxime a função $f(x)$ razoavelmente bem. Existem muitos métodos para resolver este problema, chamados métodos de região de confiança.

Na maioria dos casos a matriz $J_k^T J_k$ do modelo m_k é definida positiva, o que nos possibilitará utilizar o método Dogleg para resolver o problema proposto. Existem outros métodos de região de confiança que não necessitam que a matriz do modelo seja definida positiva. Tais métodos não serão estudados neste trabalho.

Por fim, na última parte, vamos apresentar uma implementação computacional para esses casos e alguns exemplos utilizando funções específicas.

Referências bibliográficas

Fundamentals of Matrix Computations. David S. Watkins. Wiley Interscience, 2002.

Otimização Contínua: Aspectos Teóricos e Computacionais. Ademir A. Ribeiro e Elizabeth W. Karas. São Paulo: Cengage Learning, 2013.

Numerical Optimization. Jorge Nocedal e Stephen J. Wright. Springer, 2006.