Estimador de Mínimos quadrados Subdeterminados:

O estimador de mínimos quadrados:

$$\hat{\bar{\mathbf{p}}} = \left(\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{T}\,\bar{\bar{\mathbf{A}}}\right)^{-1}\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\,\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$$

só pode ser empregado se a matriz a ser invertida ($\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\bar{\bar{\mathbf{A}}}$) for de posto completo. Como a matriz de sensibilidade $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é N x M, o produto $\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é M x M. Assim, $\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ deve ter posto M. Como o posto de uma matriz que é obtida pelo produto de duas outras matrizes é no máximo igual ao menor posto das matrizes, então temos que o posto de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\bar{\bar{\mathbf{A}}} \leq$ min(M,N), presumindo-se que $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ tem posto completo, isto é seu posto é min(M,N).

Desta forma para usarmos o estimador de mínimos quadrados é necessário, embora não suficiente que N $\geq$ M, isto é que o número de observações (N) seja pelo menos igual ao número de parâmetros (M). Se o número de parâmetros for superior ao número de observações (se M > N), então o posto de $\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ é no máximo igual a N. Neste caso a deficiência de posto da $\bar{\bar{\mathbf{A}}}^{\mathbf{T}}\bar{\bar{\mathbf{A}}}$ implica infinitas soluções para o sistema $\bar{\bar{\mathbf{A}}}\bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}$.

Veja o exemplo abaixo um sistema subdeterminado (N < M) através de um problema matemático simples

EXEMPLO:

$$\begin{cases} x + 2y + z = 8 \\ 3x + 2y + 2z = 13 \end{cases}$$

Este sistema acima é do tipo sub-determinado (N < M), neste caso N=2 e M=3. O número de parâmetros Linearmente Independente (LI) é M - N = 1. Seja z este parâmetro. O sistema acima pode então ser reescrito em termos deste parâmetro:

$$\begin{cases} x + 2y = 8 - z \\ 3x + 2y = 13 - 2z. \end{cases}$$

$$\begin{cases} x + 2y = 8 - z \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases}$$

$$\begin{cases} x + (13 - 2z - 3x) = 8 - z \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases} \quad \begin{cases} -2x = 8 - z - 13 + 2z \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases} \quad \begin{cases} -2x = -5 + z \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases}$$

$$\begin{cases} -2x = -5 + z \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases} \quad \begin{cases} x = (5 - z)/2 \\ 2y = 13 - 2z - 3x \end{cases} \quad \begin{cases} x = \frac{5}{2} - \frac{z}{2} \\ y = \frac{11}{4} - \frac{z}{4} \end{cases}$$

A cada valor atribuído a z (qualquer no. real) há uma solução exata para o sistema original. Assim se z=3, então x=1 e y=2 satisfazem exatamente o sistema original. Desse modo há infinitas soluções para este sistema. Para obter uma solução única, ou seja, para transforma este problema mal-posto em um problema bem-posto, é preciso introduzir informações a priori sobre os parâmetros.

Informação a priori introduzida no caso dos mínimos quadrados subdeterminado:

A informação introduzida no caso dos mínimos quadrados subdeterminado, é que a solução tenha MÍNIMA NORMA EUCLIDEANA, ou seja, procuraremos:

$$\min \quad \bar{\mathbf{p}}^T \, \bar{\mathbf{p}} = \min \; \| \; \bar{\mathbf{p}} \; \|^2$$

Como qualquer solução neste caso explica exatamente as observações, temos N vínculos da forma:

$$\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\bar{\mathbf{A}}} \, \bar{\mathbf{p}},$$

Desse modo, o problema é formulado como:

$$\min \quad \bar{\mathbf{p}}^T \, \bar{\mathbf{p}}$$

$$\text{sujeito a}: \; \bar{\bar{\mathbf{A}}} \, \bar{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} \quad ,$$

ou ainda

$$\begin{cases} \min \ \bar{\mathbf{p}}^{T} \bar{\mathbf{p}} \\ \text{sujeito a: } \ \bar{\bar{\mathbf{A}}} \bar{\mathbf{p}} - \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\mathbf{0}} \end{cases} .$$

Este problema vinculado de minimizar a função

$$\begin{cases} \phi(\bar{\mathbf{p}}) = \bar{\mathbf{p}}^{T} \bar{\mathbf{p}} \\ \text{sujeito a N vínculos} \\ \bar{\mathbf{f}}(\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}) = \bar{\bar{\mathbf{A}}} \bar{\mathbf{p}} - \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\mathbf{0}} \end{cases} \qquad (1)$$

pode ser resolvido através de dois diferentes métodos. O primeiro é o método direto em que os vínculos são tratados de modo explicito. O segundo modo de resolver o método dos multiplicadores de Lagrange que iremos mostrar a seguir.

.

Solução de um problema de otimização vinculada

1. Através do tratamento explicito dos vínculos (método direto):

Seja uma função $\phi \ (\bar{\mathbf{p}})$ de M variáveis, cujo mínimo é procurado, sujeito a N vínculos $\mathbf{f} \ (\bar{\mathbf{p}}) = \bar{\mathbf{0}}$, representado por um sistema de N equações nas M variáveis. Vamos apresentar agora a solução deste problema de otimização vinculada através de um tratamento explícito dos vínculos que chamaremos de método direto. Para tanto seguiremos os seguintes passos

- Passo 1: Formulação do problema de otimização vinculado

$$MIN \quad \phi(\bar{\mathbf{p}})$$

sujeito a

$$\bar{\mathbf{f}}(\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}}) = \bar{\mathbf{0}}$$

Este sistema permite, em princípio, explicitar N variáveis em termos das demais variáveis, cada equação explicitando uma variável em termos das outras. Desta forma o passo 2 consiste em:

- <u>Passo 2: Explicitar N variáveis em termos das outras N-M variáveis:</u>

Se pudermos expressar as N variáveis em termos das outras M – N de forma explicita, teremos reduzido de M variáveis para um sistema de M – N variáveis, que são usadas na expressão a ser minimizada. Desta forma o passo 3 consiste em:

- <u>Passo 3: Formulação do novo sistema com N-M variáveis a ser minimizado</u>

Para minimizar a nova função, agora reduzida para M-N variáveis, toma-se as derivadas parciais das M-N variáveis que restam após a substituição das N variáveis que foram explicitadas em termos das demais. Desta forma o passo 4 consiste em:

- <u>Passo 4: Minimização do novo sistema para as N - M variáveis</u>

Finalmente, estimado as M-N variáveis no passo 4 agora teremos de substituir as M – N variáveis estimadas na N variáveis que forma explicitadas no passo 2. Desta forma o passo 5 consiste em:

- <u>Passo 5: Substituir nas N variáveis explicitadas no passo 2 as estimativas das M – N variáveis obtidas no passo 4</u>

Exemplo de Solução MQ via método direto:

Considere um problema linear representado por um sistema de 1 equação (observação) e 2 incógnitas (parâmetros) em que $\overline{\overline{\mathbf{A}}} = [2 \quad 1]$ e $\overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = 2$. Temos então N=1 e M=2. Neste exemplo estimaremos os parâmetros p_1 e p_2 (M=2) através de uma única equação (N=1) usando-se o vínculo da mínima norma Euclideana dos parâmetros sujeito ao ajuste ser exato, i.e., usaremos a formulação dos Método dos MQ Subdeterminado:

- Passo 1: A formulação do problema de otimização vinculado

$$\begin{cases} \min \ \bar{\mathbf{p}}^{\mathrm{T}} \, \bar{\mathbf{p}} \\ \text{sujeito a} : \ \bar{\bar{\mathbf{A}}} \, \bar{\mathbf{p}} - \bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \bar{\bar{\mathbf{0}}} \end{cases} .$$

$$\begin{cases} \min \quad p_1^2 + p_2^2 \\ \text{sujeito a } 2\,p_1 + p_2 - 2 = 0 \end{cases}$$

- Passo 2: Explicitar N variáveis em termos das outras N-M variáveis:

Neste caso temos N=1 e M=2, então explicitaremos um única variável

$$p_2 = 2 - 2\,p_1$$

- Passo 3: Formulação do novo sistema com N - M variáveis a ser minimizado

Como neste caso temos N=1 e M=2, então formularemos um novo sistema com 1 única variável.. Para tanto basta substituir as N variáveis explicitadas na equação que será minimizada. O novo sistema a ser resolvido, neste caso, é

$$\Big\{ \min \quad p_1^2 + (2 - 2\,p_1)^2$$

Veja agora que teremos de minimizar a um sistema agora reduzido a uma única variável p_1. Para tanto tomaremos as derivadas parciais em relação p_1 e igualaremos o resultado a zero.

- Passo 4: Minimização do novo sistema para as N - M variáveis

$$\frac{\partial}{\partial\, p_1} \left\{ p_1^2 + (2 - 2\,p_1)^2 \right\} = 0$$

$$2\,p_1 + 2\,(2 - 2\,p_1)(-2) = 0$$

$$2\,p_1 + 8\,p_1 + 8 = 0$$

$$p_1 = 4 / 5$$

- <u>Passo 5: Substituir nas N variáveis explicitadas no passo 2 as estimativas das M – N variáveis obtidas no passo 4</u>

$$p_2 = 2 - 2p_1 = 2 - 2\left(\frac{4}{5}\right) = \frac{2}{5}$$

2. <u>Através do método dos Multiplicadores de Lagrange:</u>

O problema vinculado formulado em (1) pode ser resolvido pelo método direto em que explicitamos os vínculos. No entanto, um problema surge quando as equações $\mathbf{f}\,(\overline{\mathbf{p}}) = \overline{\mathbf{0}}$ não podem ser rescritas na forma de N variáveis explicitadas em termos das outras M – N variáveis. Neste caso a teoria dos mutiplicadores de Lagrange fornece um meio para tratar os vínculos de forma implícita.

Solucionaremos o problema de

MINIMIZAR $\phi\,(\overline{\mathbf{p}})$

SUJEITO A : $\mathbf{f}\,(\overline{\mathbf{p}}) = \overline{\mathbf{0}}$,

usando o método do multiplicadores de Lagrange.

Para o mínimo da função $\phi\,(\overline{\mathbf{p}})$ existir temos:

$$d\phi\,(\overline{\mathbf{p}}) = \frac{\partial \phi}{\partial p_1} dp_1 + \frac{\partial \phi}{\partial p_2} dp_2 + \ldots + \frac{\partial \phi}{\partial pM} dp_M = 0 \qquad ..$$

As perturbações $dp_{i,}$ estão, por sua vez ligadas pelos vínculos o que fornece:

$$df_i\,(\overline{\mathbf{p}}) = \frac{\partial f_i}{\partial p_1} dp_1 + \frac{\partial f_i}{\partial p_2} dp_2 + \ldots + \frac{\partial f_i}{\partial pM} dp_M = 0 \qquad , i = 1,2,\ldots,N, \qquad ..$$

uma vez que $f_i \equiv 0$ e por conseqüência suas derivadas serão também identicamente nulas.

Agora vamos multiplicar as N equações acima por N parâmetros ainda não determinados λ_i , i = 1,2….N, e somar a equação d $\Phi(\mathbf{p})$.

$$d\phi + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \, df_i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial p_1} + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial p_1} + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial p_1} + \ldots + \lambda_N \frac{\partial f_N}{\partial p_1} \right) dp_1 \quad +$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial p2} + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial p2} + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial p2} + \ldots + \lambda_N \frac{\partial f_N}{\partial p_2} \right) dp_2 \quad + \ldots = 0 \qquad .$$

Como $d\phi + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \, df_i \, (\overline{\mathbf{p}})$ deve ser nulo para qualquer valor dos multiplicadores de Lagrange λ_i, i = 1,2….N, ela deve também ser nula para os valores particulares de que λ_i que cancelam cada termo entre parênteses da expressão acima. Assim o problema de minimização vinculada é transformado no problema de minimização NÃO vinculada da função

$$\Gamma = \phi + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \, f_i \, (\overline{\mathbf{p}})$$

que pode se escrita como também escrita como:

$$\Gamma = \phi + \overline{\mathbf{f}}^{\mathsf{T}} \overline{\boldsymbol{\lambda}} \, ,$$

em que $\overline{\mathbf{f}}$ e $\overline{\boldsymbol{\lambda}}$ são vetores N-dimensionais.

A condição necessária para a existência de um mínimo da função não vinculada $\Gamma\,(\overline{\mathbf{p}})$ é:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial p_j} = 0 \, , \qquad j = 1, 2 \ldots, \; M$$

ou seja,

$$\frac{\partial \left\{ \phi + \overline{\mathbf{f}}^{\mathsf{T}} \overline{\boldsymbol{\lambda}} \right\}}{\partial p_j} = \frac{\partial \phi}{\partial p_j} + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial p_j} + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial p_j} + \ldots + \lambda_N \frac{\partial f_N}{\partial p_j} = 0, \qquad j = 1,2 \ldots, M$$

Exemplo de Solução MQ via método dos multiplicadores de Lagrange:

Considere um problema linear representado por um sistema de 1 equação (observação) e 2 incógnitas (parâmetros) em que $\overline{\overline{\mathbf{A}}} = [2 \quad 1]$ e $\overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = 2$. Temos então N=1 e M=2. Neste exemplo estimaremos os parâmetros p_1 e p_2 (M=2) através de uma única equação (N=1) usando-se o vínculo da mínima norma Euclideana dos parâmetros sujeito ao ajuste ser exato, i.e., usaremos a formulação dos Método dos MQ Subdeterminado:

- Passo 1: A formulação do problema de otimização vinculado

$$\begin{cases} \min \ \overline{\mathbf{p}}^{\mathrm{T}} \, \overline{\mathbf{p}} \\ \text{sujeito a}: \ \overline{\overline{\mathbf{A}}} \, \overline{\mathbf{p}} - \overline{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}} = \overline{\overline{\mathbf{0}}} \end{cases} .$$

$$\begin{cases} \min \quad p_1^2 + p_2^2 \\ \text{sujeito} \ \ \text{a} \ 2\,p_1 + p_2 - 2 = 0 \end{cases}$$

- Passo 2: Transformação do problema de minimização vinculada no problema de minimização NÃO vinculada usando N multiplicadores de Lagrange

A função NÃO vinculada a ser minimizada é dada por

$$\Gamma = \phi + \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} \lambda_{\mathrm{i}} \, f_i \, (\overline{\mathbf{p}})$$

Neste caso $\phi = p_1^2 + p_2^2$ e como temos um único vinculo (N=1) isto é ($2p_1 + p_2 - 2 = 0$) teremos apenas um único Multiplicador de Lagrange (λ). De modo que a nova função não vinculada a ser minimizada é:

$$\Gamma = p_1^2 + p_2^2 + \lambda \ \left(2\,p_1 + p_2 - 2\right)$$

- Passo 3: Minimizar a função não vinculada

Neste exemplo temos dois parâmetros p_1 e p_2 (M=2) então a condição necessária para a existência de um mínimo da função não vinculada Γ é:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial p_1} = 0 ,$$

e

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial p_2} = 0 ,$$

logo temos

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Gamma}{\partial p_1} = 2 p_1 + \lambda 2 = 0 , \\ \dfrac{\partial \Gamma}{\partial p_2} = 2 p_2 + \lambda = 0 \end{cases}$$

- <u>Passo 3: Expressar as M variáveis em termos dos N multiplicadores de Lagrange</u>

Neste exemplo temos (M=2) apenas um multiplicador de Lagrange (N=1)

$$\begin{cases} p_1 = -\lambda , \\ p_2 = -\dfrac{\lambda}{2} \end{cases}$$

- <u>Passo 4: Estimar os N Multiplicadores de Lagrange</u>

Vamos agora substituir as expressões acima no vínculo do nosso problema objetivando estimar os N multiplicadores de Lagrange.

O vinculo do nosso problema é

$$2 p_1 + p_2 - 2 = 0$$

Substituindo na equação acima nos parâmetros p_1 e p_2 temps

$$-2 \lambda - \frac{\lambda}{2} = 2$$

resultando em

$$\lambda = -\frac{4}{5}$$

- <u>Passo 5: Substituindo os N Multiplicadores de Lagrange nas expressões dos parâmetros obtidos via passo 4:</u>

$$\begin{cases} p_1 = -\lambda = \dfrac{4}{5} \\ p_2 = -\dfrac{\lambda}{2} = \dfrac{2}{5} \end{cases}$$

<u>INTERPRETAÇÃO DOS MULTIPLICADORES DE LAGRANGE</u>

O uso dos Multiplicadores de Lagrange pode se interpretado de duas maneiras equivalentes:

Primeira Interpretação do Método dos Multiplicadores de Lagrange:
As M variáveis originais a serem estimadas são expressas em termos dos N multiplicadores de Lagrange (λ_i , i = 1,2, …, N) que são introduzidos no sistema original de N equações (com M variáveis) resultando em um novo sistema agora com N equações e N variáveis a serem estimadas (os N multiplicadores de Lagrange). Os multiplicadores são então estimados e depois substituídos nas respectivas relações com as variáveis originais.

Segunda Interpretação do Método dos Multiplicadores de Lagrange:
A condição $\dfrac{\partial\Gamma}{\partial p_j} = 0, \quad j = 1,2..., M$ acrescentam M equações as N equações do vínculo, totalizando M+N em M+N variáveis a serem estimadas, sendo que M são as variáveis originais do sistema e N são os multiplicadores de Lagrange.